
Explorando a equação de Dirac: Um passeio por Isolantes Topológicos e Férmions de Majorana

Oswaldo Ferreira Neto



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
CURSO DE FÍSICA DE MATERIAIS

Uberlândia
2019

Oswaldo Ferreira Neto

**Explorando a equação de Dirac: Um passeio por
Isolantes Topológicos e Férmions de Majorana**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentada ao Programa de graduação em Física de Materiais do Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia como parte dos requisitos para a obtenção do título de Bacharel em Física de Materiais.

Área de concentração: Física de Materiais

Orientador: Marco Aurélio Boselli

Uberlândia

2019

Dedico esta monografia a minha avó, Clarinda, pelo apoio incondicional durante esses quatro, paradoxalmente breves e intermináveis, anos de graduação.

Agradecimentos

É impossível escrever estes agradecimentos sem cometer qualquer tipo de injustiça, já que foram muitos os que fizeram parte da trajetória que me trouxe até aqui. Começo, portanto, agradecendo a todos aqueles que sabem que de algum modo fizeram parte dessa história.

Foram vários os professores que contribuíram para a minha maneira de pensar, enxergar e fazer física. Mas aqui gostaria de agradecer especialmente ao Prof^o Boselli pela liberdade dada e o apoio durante a iniciação científica e TCC. Além disso, foi com esse apoio também nas disciplinas que aprendi, a duras penas, a manter a calma e a encarar os problemas como solúveis. Outra figura importante foi a do Prof^o Marcel, com o qual aprendi a, pelo menos tentar, buscar maneiras intuitivas de enxergar conceitos e problemas físicos, construindo interpretações que me permitissem entender, nos meus próprios termos, do que se trata cada assunto. Por fim, a Prof^o Lilliana será para sempre uma inspiração no que diz respeito a maneira de lecionar, já que a vi construindo uma narrativa que faça sentido, buscando, com sinceridade, convencer os alunos e sempre se questionar enquanto explica. Sem contar coisas como as múltiplas e boas fontes em que se baseia e ótimas interpretações físicas.

A presença dos meus amigos e colegas que encontrei por causa do curso, também foi fundamental nesses quatro anos. Em especial, agradeço à Fernanda, pelo apoio como amiga e pelas discussões sobre física. Agradeço à Lais pelo apoio, pelas perguntas que sempre me fazem pensar mais sobre o que já julgava entender e por me ajudar sempre que precisei. Agradeço ainda ao Felipe e à Saula, por me acompanharem nessa caminhada tortuosa, e por terem permanecido na minha companhia até aqui.

Agradeço por fim, aos meus avós, em especial, à minha avó, Clarinda e ao meu pai, por terem tornado possível que eu estivesse aqui.

“Physics isn’t the most important thing. Love is.”
(Richard P. Feynman)

Resumo

Nesta monografia buscou-se compreender os argumentos físicos e matemáticos que levaram à construção da equação de Dirac e entender o que a tem tornado fonte de interesse crescente dos físicos da matéria condensada. Para tanto, fez-se uma discussão contextualizada historicamente do procedimento adotado por Paul Dirac para derivar a sua equação, e com esta em mãos, foram discutidas algumas propriedades importantes. Após isto, baseado em uma literatura já bastante rica, argumentou-se sobre como ela pode ser utilizada na elaboração de descrições efetivas de Isolantes Topológicos, utilizando inicialmente uma argumentação geral e encerrando com o caso do Seleneto de Bismuto (Bi_2Se_3). Por fim, foi discutido como a previsão teórica dos Férmions de Majorana surge da investigação de soluções particulares da equação de Dirac, e como essas partículas têm sido utilizadas no estudo dos chamados Supercondutores Topológicos.

Palavras-chave: equação de Dirac. Isolantes Topológicos. Férmions de Majorana.

Abstract

In this monography, we sought to understand the physical and mathematical reasoning that led Paul Dirac to build his famous equation, and why it has attracted the attention of the condensed matter physicists in the last decades. We then make a historically based discussion about the process of building the Dirac equation and describe some of its main properties. With all that well established, we base ourselves in an already rich literature, to argue in favor of using the Dirac equation to build effective models to describe Topological Insulators. We start with a very general discussion which is finished with the investigation of Bismuth Selenide (Bi_2Se_3). We also present a brief discussion about how Majorana Fermions can be predicted by an investigation of real solutions to the Dirac equation, and how those fermions have been used to describe topological superconductors.

Keywords: Dirac equation. Topological Insulators. Majorana Fermions.

Lista de ilustrações

- Figura 1 – Teoria do buraco de Dirac (“*Hole Theory*”). Quando um fóton excita o mar de Dirac, um elétron é promovido deixando um buraco para trás, que se comporta como uma partícula com mesmas propriedades do elétron, mas com carga positiva. 28
- Figura 2 – Figura ilustrativa de uma possível relação de dispersão para um isolante fictício. Perceba que há um *gap* entre a banda de condução e a de valência, a presença desse *gap* define um isolante. 38
- Figura 3 – Ilustração da estrutura de bandas de um Isolante Topológico. 38
- Figura 4 – Imagens produzidas por Keenan Crane [1]. Uma vaca idealizada (sem buracos) é topologicamente equivalente a uma esfera. 39
- Figura 5 – Distribuição de probabilidade da solução para os estados de borda com energia $E=0$ 44
- Figura 6 – Caso trivial. Não há inversão de spin. 45
- Figura 7 – Caso não-trivial. Há inversão de spin ao andarmos de 0 a ∞ no eixo p_x 45
- Figura 8 – Ilustração de uma cadeia semi-infinita. 46
- Figura 9 – Distribuição de probabilidade da solução para os estados de energia nula, na equação de Dirac modificada. 48
- Figura 10 – Cone de Dirac. Relação de dispersão do hamiltoniano efetivo próximo ao ponto $k=0$ 50
- Figura 11 – Adaptado da referência [2]. (a) Estrutura cristalina do Bi_2Se_3 . $\mathbf{t}_1 = (\sqrt{3}a/3, 0, c/3)$, $\mathbf{t}_2 = (-\sqrt{3}a/6, 2, c/3)$ e $\mathbf{t}_3 = (-\sqrt{3}a/6, -a/2, c/3)$, onde a é o espaçamento da rede no plano $x - y$ e c é o espaçamento da rede ao longo da direção z . A camada quádrupla é mostrada na caixa em vermelho com $Se\ 1 - Bi\ 1 - Se\ 2 - Bi\ 1' - Se\ 1'$. $Se\ 1$ $Bi\ 1$ e $Se\ 1'$ ($Bi\ 1'$) são equivalentes. (b) Zona de Brillouin do Bi_2Se_3 . (c) O triângulo no plano interno tem três posições possíveis A, B e C. 51

Figura 12 – Ilustração da cadeia de Kitaev. Os sítios em vermelho correspondem a férmions de Majorana, os quadrados azuis correspondem a estados eletrônicos completos e os quadrados pretos a modos desemparelhados. 62

Figura 13 – Adaptado da referência [3]. (A) Resumo das propostas teóricas. (Em cima) Dispositivo idealizado com um nanofio semiconductor na proximidade de um supercondutor de ondas-s. Um campo magnético externo B é alinhado paralelo ao fio. O spin-órbita Rashba é indicado como um campo magnético efetivo, B_{so} , apontando na direção perpendicular ao nanofio. As estrelas vermelhas indicam as posições esperadas do par de Majorana. (Em baixo) Energia, E , por momento, k , para um fio 1D com interação spin-órbita Rashba, que desloca a banda spin-down (azul) para a esquerda e a banda spin-up (vermelho) para a direita. As parábolas azul e vermelho são para o caso $B=0$; curvas pretas são para $B \neq 0$, ilustrando a formação de um *gap* próximo a $k=0$ de tamanho E_z (μ é a energia de Fermi com $\mu = 0$ definida no cruzamento das parábolas em $k=0$). O supercondutor induz um emparelhamento entre os estados de momentos e spin opostos, criando um *gap* de tamanho Δ . (B) Implementando as propostas teóricas. imagem de escaneamento microscópico eletrônico de um dispositivo com um contato normal (N) e um contato supercondutor (S). O contato S cobre apenas a parte direita do nanofio. Os portões na base, numerados de 1 a 4, estão cobertos com um dielétrico. [Em (B), a barreira de potencial do portão também é mostrada em verde.] Uma voltagem externa, V , aplicada entre N e S cai através da barreira de tunelamento. Estrelas vermelhas indicam, novamente, as posições esperadas para o par de majorana. Apenas o Majorana da esquerda é investigado nesse experimento. (D) Exemplo de condutância diferencial, dI/dV , por V com $B = 0$ e $b = 65$ mk, servindo como uma medida espectroscópica da densidade de estados na região do nanofio abaixo do supercondutor. Dados são do dispositivo 1. Os dois picos grandes indicados pelas setas, separados por 2Δ , correspondem às singularidades das quase-partículas abaixo do *gap* induzido. Dois picos menores de *subgap*, indicados por setas, correspondem provavelmente aos estados ligados de Andreev localizados simetricamente ao redor da energia zero. Medidas são feitas em refrigeradores de diluição com o uso de técnicas tradicionais de baixa frequência “*lock-in*” (frequência = 77 Hz, excitação = $3 \mu V$) com geometria de corrente-voltagem de quadri-terminal (dispositivos 1 e 3) ou bi-terminal (dispositivo 2). 64

Sumário

1	INTRODUÇÃO	17
1.1	Dirac e sua equação	17
1.2	Os Isolantes Topológicos	18
1.3	Os Férmions de Majorana	19
1.4	Objetivos	19
2	A EQUAÇÃO DE DIRAC	21
2.1	Construindo a equação de Dirac	21
2.2	A forma covariante da equação de Dirac	24
2.3	Corrente de Probabilidade	25
2.4	Soluções da equação de Dirac	26
2.5	Simetrias	29
2.6	Spin na Teoria de Dirac	32
2.7	Quantização do Campo de Dirac	33
2.8	O limite não relativístico da Equação de Dirac	36
3	OS ISOLANTES TOPOLÓGICOS E A EQUAÇÃO DE DIRAC	37
3.1	Isolantes Topológicos	37
3.2	Aplicação da equação de Dirac em Isolantes Topológicos	41
3.2.1	Introduzindo a correção quadrática	45
3.2.2	Estados de borda da equação modificada	46
3.2.3	O caso 3D	49
3.3	Modelo Efetivo para os Estados de Borda do Bi_2Se_3	51
4	OS FÉRMIONS DE MAJORANA	57
4.1	Férmions de Majorana	57
4.2	Férmions de Majorana em Supercondutores	59
4.2.1	A cadeia de Kitaev	60

4.3	Sobre o que os torna especiais	62
5	CONCLUSÃO	67
	Referências	69

Introdução

1.1 Dirac e sua equação

Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984) foi um (excêntrico ¹) físico inglês que deu contribuições fundamentais para o desenvolvimento teórico da Mecânica Quântica. Dentre elas destacam-se a sua formulação da mecânica quântica [6, 7], que se baseava na observação da relação entre os comutadores da Mecânica Quântica Matricial de Heisenberg e os parênteses de Poisson da Mecânica Clássica, e a formulação de uma equação de onda relativística [8, 9]. Esta última será o principal objeto de estudo desta monografia.

Dirac foi um incansável defensor da importância da beleza nas teorias físicas [10, 11, 5]. Quando publicou sua teoria em 1928, já havia na literatura uma proposta de equação de onda relativística, hoje conhecida como equação de Klein-Gordon (EKG), em homenagem a Oscar Klein e Walter Gordon em 1926². Essa equação contudo não o agradava. Ela continha derivadas segundas no tempo, o que ele via como uma imperfeição básica da teoria. E, de fato, as primeiras tentativas de interpretação da equação de Klein-Gordon levavam a probabilidades negativas [13]. Foi essa insatisfação com a proposta existente e a sua visão sobre a beleza das leis da física que o conduziram mais tarde à sua equação. Já no fim de sua carreira, devido à esta mesma linha de pensamento, Dirac tornou-se um dos grandes críticos dos avanços que vinham sendo feitos na Teoria da Eletrodinâmica Quântica (QED)[5, Capítulo 6].

A equação de Dirac (ED), que é como ficou conhecida a equação de onda relativística obtida por ele, foi um dos maiores triunfos da física teórica do século XX. Unindo relatividade especial e mecânica quântica, ela levou à previsão da antimatéria, incorpora naturalmente a existência do spin do elétron (ou de outras partículas de spin $\frac{1}{2}$) e fornece

¹ A sua personalidade e as anedotas a seu respeito são em si mesmas bastante interessantes. Mais sobre esse assunto nos livros [4, 5].

² Schrödinger já havia derivado esta equação antes mesmo de propor a equação que hoje leva o seu nome. Porém, como ela previa erroneamente o espectro do átomo hidrogênio, ele a abandonou e preferiu formular uma teoria não relativística [12].

uma expressão que descreve a estrutura fina do átomo de hidrogênio³[14].

1.2 Os Isolantes Topológicos

No fim do século XIX o avanço das teorias em eletromagnetismo, trouxeram com o trabalho de Edwin H. Hall (em 1879) [15] a descoberta do chamado efeito Hall. Ele também percebeu com novos experimentos, um ano após a sua descoberta, que a Resistência Hall poderia ser proporcional a magnetização em metais ferromagnéticos [16]. A explicação para este último efeito só viria décadas depois com o desenvolvimento da teoria de bandas eletrônicas.

A física por trás dos achados de Hall floresceu e percebeu-se que havia uma versão do efeito que se relacionava com o spin. Dyakonov e Perel, em 1971, foram os primeiros a perceber esta relação [17], e esta versão ramificou-se, posteriormente, em efeito spin-Hall extrínseco [18] e intrínseco (proposto por dois grupos em 2003 [19, 20]). Outros fenômenos de importância física foram encontrados, mas pode-se destacar que em 2005, Kane e Mele, generalizando um modelo de Haldane (de 1988) [21] propuseram um modelo para o grafeno que consiste de “*uma malha de elétrons spin $-\frac{1}{2}$ com acoplamento spin-órbita*” [22, p. 4] e [23]. Este modelo exibiu o chamado efeito spin-Hall quântico (SHQ), também denominado Isolante topológico bidimensional.

Grosso modo, os Isolantes Topológicos (IT) podem ser vistos como materiais que são isolantes no seu interior mas que possuem estados metálicos nas suas bordas. Nesse sentido, podemos pensá-los como generalizações tridimensionais do efeito SHQ, já que onde antes haviam estados metálicos nas extremidades de um sistema 1D, agora temos estados de borda em uma estrutura 3D.

A conexão entre a teoria de Dirac e o estudo dos Isolantes Topológicos não é clara a primeira vista, mas, qualitativamente, é possível argumentar que as simetrias que a equação de Dirac possui e o fato de esta prever efeitos importantes para os IT, como o efeito *spin-órbita*, nos indica esta relação. Contudo, o argumento definitivo do porque é possível estabelecer esta conexão entre a teoria de Dirac e a descrição dessa classe de materiais, é a observação do simples e pragmático fato de que os hamiltonianos⁴ que descrevem os IT possuem uma estrutura idêntica a da ED.

Os IT têm atraído um crescente interesse da comunidade científica e tecnológica nos últimos anos. Isso se justifica principalmente pelo fato de os estados metálicos que existem em suas bordas serem “protegidos” pela (s) simetria (s) do sistema. Por exemplo, em sistemas com simetria de reversão temporal, perturbações que não destruam essa simetria,

³ O espectro de energia obtido de cálculos diretos com a equação de Dirac não descreve um efeito chamado *lamb shift* e nem a estrutura *hiperfina*. Para mais detalhes veja [14].

⁴ É importante enfatizar que eles podem ser derivados de maneira completamente independente da teoria de Dirac.

não são capazes de fazer desaparecer esses estados metálicos, o que os tornam bastante robustos.

1.3 Os Férmions de Majorana

Poucos anos após Dirac propor sua famosa equação, em 1932, Ettore Majorana desenvolveu [24] uma teoria em que buscava-se uma simetria entre elétron e pósitron, descartando a necessidade de pensar em termos de antipartículas. Para conseguir tal feito, Majorana estudou a possibilidade de encontrar soluções puramente reais para a equação de Dirac.

Essa teoria deu origem à física do que se convencionou chamar de Férmions de Majorana. Hoje, a teoria Férmions de Majorana se mostra importante para propostas de descrição dos neutrinos [25], teorias de supersimetria em física de partículas e até na descrição de fenômenos em supercondutores[26].

Em supercondutores ditos *topológicos*, aplicação para a qual daremos atenção nesta monografia, observam-se modos oriundos do comportamento coletivo dos elétrons das redes, que se comportam como Férmions de Majorana. Ou seja, nesses sistemas há o aparecimento, não de partículas fundamentais, como no caso do neutrino, por exemplo, mas sim *quase partículas* que possuem as mesmas propriedades que caracterizam os Férmions de Majorana.

1.4 Objetivos

Uma vez identificadas as motivações para nos dedicarmos ao estudo da Equação de Dirac e sua relação com os Isolantes Topológicos e Férmions de Majorana, podemos estabelecer os objetivos que esta monografia pretende alcançar.

O objetivo geral é que o leitor consiga, ao fim da leitura, compreender o porque a teoria de Dirac têm produzido tanto impacto nas pesquisas recentes em física da matéria condensada, em especial, no que diz respeito à física dos materiais ditos *topológicos*. Em específico, busca-se no caso dos Isolantes Topológicos, fornecer bons argumentos a respeito da possibilidade de utilizar a equação de Dirac para construir descrições efetivas dos estados de borda desses materiais.

Para os Férmions de Majorana, a meta é discutir como a busca por encontrar soluções puramente reais para a equação de Dirac nos permite definir este tipo especial de férmions. Além disso, uma discussão elementar sobre o seu aparecimento em supercondutores será feita, na tentativa de convencer o leitor da sua importância para a física e para as aplicações tecnológicas.

A Equação de Dirac

2.1 Construindo a equação de Dirac

Como apontado na introdução, quando Dirac formulou sua teoria já existia uma proposta de equação de onda relativística. Esta fora proposta por Oskar Klein e Walter Gordon em 1926 e tinha a seguinte forma:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + m^2\right)\psi(x, t) = 0, \quad (1)$$

onde m é a massa de repouso da partícula descrita e ψ é a função de onda que descreve o seu comportamento. Note que tomamos $c = \hbar = 1$ (que será a convenção adotada daqui em diante, salvo os casos em que for explicitamente dito o contrário). Além disso, as energias que correspondem às soluções dessa equação obedecem a relação relativística:

$$E^2 = p^2 + m^2, \quad (2)$$

onde o primeiro termo se refere à uma contribuição cinética¹ para a energia, e o segundo à chamada *energia de repouso* da partícula. Observe que, e não há como enfatizar a importância desse fato o suficiente, esta expressão prevê soluções positivas e negativas para a energia. Mais adiante, um problema semelhante irá surgir na teoria de Dirac e discutiremos detalhadamente o que significa existirem soluções negativas.

Perceba que diferente da equação de Schrödinger (que já era bem sucedida na explicação de diversos fenômenos quando a teoria de Klein-Gordon surgiu), esta equação é de segunda ordem no tempo, e portanto exige, além de um estado inicial, outra condição de contorno para nos fornecer a dinâmica da partícula descrita. Além disso, em última instância, ter uma equação de segunda ordem no tempo nos conduz à *probabilida-*

¹ Aqui uma sutileza, essa contribuição se relaciona com o movimento da partícula, mas essa não é a expressão da energia cinética relativística, que é na verdade dada por $E = \gamma mc^2$, onde γ é o fator de lorentz.

des negativas². Uma discussão sobre este problema pode ser encontrada nas referências [13, 14].

Insatisfeito³ com a solução encontrada por Klein e Gordon para o problema de desenvolver uma teoria relativística para o elétron, Dirac insistiu na busca de uma equação que satisfizesse o que para ele eram princípios inegociáveis. O primeiro era que, assim como a equação de Schödinger (ES), a desejada equação deveria ter a forma⁴

$$H_D\psi = i\frac{\partial}{\partial t}\psi, \quad (3)$$

de modo a permitir uma interpretação probabilística análoga à da ES. H_D é o que chamaremos de hamiltoniano de Dirac e é um operador hermitiano. Note ainda que por se tratar de uma teoria relativística, as derivadas espaciais também devem ser de primeira ordem (é essa exigência que torna a construção da equação de Dirac mais difícil que a ES e EKG). Além disso a expressão (2) para a energia deve ser obedecida.

Daí, propomos uma equação do tipo:

$$\left(E - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \beta m\right)\psi = 0, \quad (4)$$

onde $\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ e $\alpha_0 \equiv \beta$ são operadores que atuam em ψ e são construídos de modo a garantir que a estrutura da equação obedeça às condições que mencionamos no parágrafo anterior. Perceba que eles atuam em graus de liberdade diferentes dos espaços-temporais e que em princípio não sabemos quais são, mas permitimos a sua existência para que seja possível construir a teoria. Apesar de não ser a sua intenção inicial⁵, foi aqui, com a introdução desses operadores, que Dirac incorporou o *spin* do elétron à sua teoria.

Exigir que a equação proposta (4) obedeça a expressão relativística para a energia é equivalente a exigir que:

$$\left(E^2 - p^2 - m^2\right)\psi = 0. \quad (5)$$

Multiplicando a equação (4) pela esquerda por $(E - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \beta m)$, obtemos

$$\left(E^2 - \beta^2 m^2 - (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) - 2\beta m(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})\right)\psi = 0, \quad (6)$$

² Sob a luz da Teoria Quântica de Campos o campo de Klein-Gordon é hoje entendido como um campo que descreve partículas de *spin* 0.

³ Durante a 5ª convenção de Solvay em 1927, ao ser questionado por Bohr sobre em que estava trabalhando, Dirac respondeu a Bohr que procurava uma equação relativística para o elétron, e este por sua vez respondeu-lhe que este problema já havia sido resolvido por Oskar Klein em 1926. Claro, Dirac não concordou, e hoje sabemos o desfecho desta história.

⁴ Na seção 27 (capítulo 5) de seu livro [27], Dirac faz uma argumentação interessante, baseando-se no princípio da superposição e em observações experimentais, sobre o porque a equação de onda deve ter ser linear no tempo.

⁵ Em entrevista [28] para o físico F. Hund, Dirac contou que planejava construir uma teoria sem *spin* de início e, uma vez que ela fosse bem sucedida, ele procuraria uma generalização que considerasse o *spin* do elétron.

mas podemos reescrever $(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})$ como

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) = \sum_k (\alpha^k)^2 (p^k)^2 + \sum_{\substack{k,l \\ k>l}} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) p^k p^l, \quad (7)$$

e observando que $\boldsymbol{\alpha}$ e \mathbf{p} atuam em espaços diferentes e portanto comutam, escrevemos

$$\left(E^2 - \beta^2 m^2 - \sum_k (\alpha^k)^2 (p^k)^2 + \sum_{\substack{k,l \\ k>l}} (\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k) p^k p^l - \sum_k (\alpha^k \beta + \beta \alpha^k) m p^k \right) \psi = 0. \quad (8)$$

Mas para obedecer a relação (5) os operadores α e β devem satisfazer as condições

$$(\alpha^k)^2 = \mathbb{1} \quad \alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = 0; \quad (9)$$

$$\beta^2 = \mathbb{1} \quad \alpha^k \beta^l + \alpha^l \beta^k = 0. \quad (10)$$

Assim, dizemos finalmente que

$$\left(E - \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} - \beta m \right) \psi = 0. \quad (11)$$

é a *equação de Dirac* para o elétron livre se $\boldsymbol{\alpha}$ e β satisfazem as condições (9) e (10). Na representação⁶ mais usual, também conhecida como representação de Dirac, podemos representar esses operadores como matrizes 4×4 dadas por

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix}, \quad \alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}. \quad (12)$$

onde σ_i ($i = 1, 2, 3$) são as matrizes de Pauli, e têm a forma

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

o que nos diz que as soluções ψ , cujas partes relacionadas ao *spin* são chamadas de *spinores*⁷, são matrizes coluna com quatro componentes. Além disso, se estivermos na presença de um campo eletromagnético a equação torna-se simplesmente

$$\left(E - \boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) - e\phi - \beta m \right) \psi = 0, \quad (14)$$

onde e é a carga e \mathbf{A} é o potencial vetor do campo.

⁶ No livro [13] é feita uma discussão interessante sobre o porque é necessário ter spinores que vivem em um espaço de 4 dimensões. Essa será a representação adotada, a não ser que, em algum caso específico, seja dito o contrário.

⁷ Alguns autores preferem usar *bispinor* para enfatizar o fato de serem objetos com quatro componentes, e nesse sentido os spinores são objetos com duas componentes que aparecem nas teorias não relativísticas. Aqui, sempre que o termo spinor for usado estará se referindo às soluções da equação de Dirac.

Antes de prosseguir, já é possível fazer uma importante observação. Perceba que construir uma equação que obedeça uma expressão relativística para a energia, significa ter partículas cuja energia se relaciona *linearmente* com o momento, como pode ser visto na equação (2). Além disso, como a estrutura da equação em si se baseia nessa expressão, temos um hamiltoniano que também é linear no momento. Essa é uma das propriedades “estruturais” da equação que estão por trás de diversas aplicações que vêm sendo desenvolvidas em Física do Estado Sólido. Mas vale a pena observar que, em geral, as equações que aparecem nessas aplicações *não são a equação de Dirac* e por isso é comum encontrar na literatura termos como “Hamiltoniano tipo-Dirac” ou “equação tipo-Dirac” que enfatizam esse fato. Uma das características importantes que são preservadas nessas equações que são estruturalmente semelhantes a equação de Dirac é justamente uma relação de dispersão linear da energia em relação ao momento.

2.2 A forma covariante da equação de Dirac

Em algumas aplicações e no estudo de algumas propriedades, é conveniente escrever a equação de Dirac em uma notação que explicita a sua concordância com a relatividade restrita. Um quadrivetor no espaço-tempo de Minkowski é representado nessa notação por $x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) \equiv (x^0, \mathbf{x})$, onde os índices (0, 1, 2, 3) correspondem à (ct, x, y, z) , nessa ordem. Se definirmos as matrizes $\gamma^\mu = (\beta, \beta\alpha_i)$, que na representação adotada anteriormente assumem a forma

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}. \quad (15)$$

podemos reescrever a equação de Dirac como

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\psi = 0, \quad (16)$$

onde $A_\mu = (\phi, \mathbf{A})$. Mais compactamente, se tomarmos $D_\mu \equiv i\partial_\mu - eA_\mu$ e $D_\mu\gamma^\mu = \not{D}$, ficamos com a belíssima equação de Dirac na sua forma mais simples:

$$(i\not{D} - m)\psi = 0. \quad (17)$$

Utilizando as matrizes gamma, as condições (9) e (10) assumem a forma:

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}, \quad (18)$$

que, em termos técnicos, nos dizem que essas matrizes γ^μ são geradores de dimensão 4 (são matrizes 4×4) de uma álgebra de Clifford de dimensão 4 (número de geradores). Aqui, $g^{\mu\nu}$ é a métrica (receita para medir distâncias no espaço considerado) do espaço de

Minkowski, e em forma matricial é dada por

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

As matrizes gamma possuem um enorme conjunto de propriedades que foram bem exploradas nas referências [13, 29]. Agora, a ideia é utilizar a notação introduzida para explorar algumas propriedades da equação de Dirac.

2.3 Corrente de Probabilidade

Como vimos, um dos problemas inicialmente enfrentados pela equação de Klein Gordon era o aparecimento de probabilidades negativas. Assim, verificar se é possível ter uma interpretação probabilística que não nos leve a esse tipo de problema é um dos primeiros testes a serem feitos. Começemos considerando ψ^\dagger tal que se

$$\psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

então

$$\psi^\dagger \equiv (\psi_1^* \ \psi_2^* \ \psi_3^* \ \psi_4^*), \quad (21)$$

de modo que a equação

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger \gamma^0 \quad \psi^\dagger = \bar{\psi} \gamma^0, \quad (22)$$

define $\bar{\psi}$, que é chamada de *adjunta* de ψ . Feitas essas considerações preliminares, tomemos o transposto conjugado da equação de Dirac

$$(-i\partial_\mu - eA_\mu)\psi^\dagger \gamma^{\mu\dagger} - m\psi^\dagger = 0. \quad (23)$$

Uma das propriedades das matrizes gamma nos diz que $\gamma^\mu = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$, daí

$$(-i\partial_\mu - eA_\mu)\psi^\dagger \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 - m\psi^\dagger = 0, \quad (24)$$

lembrando da definição de $\bar{\psi}$ e multiplicando pela direita por γ^0

$$(-i\partial_\mu - eA_\mu)\bar{\psi} \gamma^\mu - m\bar{\psi} = 0, \quad (25)$$

que é conhecida como *equação adjunta*. Se então multiplicarmos a equação de Dirac (16) por $\bar{\psi}$ pela esquerda e a expressão (25) por ψ pela direita e subtrairmos os resultados, chegamos em

$$i\bar{\psi} \gamma^\mu \partial_\mu \psi + i\partial^\mu \psi \gamma^\mu \bar{\psi} = i\partial^\mu (\bar{\psi} \gamma^\mu \psi) = 0, \quad (26)$$

de modo que se

$$J^\mu \equiv (\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) \equiv (P, \vec{J}), \quad (27)$$

é a *densidade de corrente de probabilidade*, ficamos com

$$\partial_\mu J^\mu = 0, \quad (28)$$

que é a *equação da continuidade* para a densidade de probabilidade na forma covariante. Perceba da definição (27) que a densidade de probabilidade P é dada pela coordenada temporal de J^μ , J^0 . Assim, note que

$$J^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi = \psi^\dagger\psi > 0, \quad (29)$$

ou seja, a densidade de probabilidade é positiva definida como desejado, o que nos permite fazer uma interpretação probabilística análoga à da ES.

2.4 Soluções da equação de Dirac

Uma das previsões mais impactantes da teoria de Dirac foi a da existência de anti-matéria. Esta foi uma das grandes realizações da física teórica do século XX e mudou as concepções da época sobre matéria e vácuo. Vejamos como as soluções para a partícula livre de Dirac nos levam à essa previsão.

Para concordar com a expressão relativística para a energia

$$E^2 = p^2 + m^2, \quad (30)$$

a teoria de Dirac deve permitir a existência de soluções negativas. Dirac não acreditava que havia algo de fundamentalmente errado nem com os princípios físicos e nem com a estrutura matemática de sua equação. Assim, ao invés de descartar essas soluções e criar uma assimetria injustificada, ele assumiu que essas soluções existiam de fato e tentou fornecer uma interpretação para elas.

Vamos começar resolvendo a equação de Dirac admitindo a existência dessas soluções. Considere $E = \pm E_p$, com $E_p > 0$, de modo que se tomarmos como ansatz

$$\psi^\pm(t, \mathbf{r}) = N e^{i(\mathbf{p}_n \cdot \mathbf{r} \mp E_p t)} \begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix}, \quad (31)$$

e considerarmos condições periódicas de contorno, implicando $p_n = \frac{2\pi}{L}(n_x + n_y + n_z)$, teremos para as soluções *positivas*

$$\begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix} E_p e^{-ipx} = \begin{pmatrix} m & -i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \\ -i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix} e^{-ipx}, \quad (32)$$

daí,

$$E_p \chi = m \chi + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \eta; \quad (33)$$

$$E_p \eta = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \chi - m \eta. \quad (34)$$

Podemos construir para esse sistema a matrix

$$M_s = \begin{pmatrix} E_p - m & \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & E_p + m \end{pmatrix}. \quad (35)$$

Daí, exigindo que o determinante se anule, $\det M_s = 0$, chegamos em

$$E_p^2 = p^2 + m^2. \quad (36)$$

Do sistema de equações temos ainda que

$$\eta = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_p + m} \chi, \quad (37)$$

tomemos $\chi^\dagger \chi = 1$, de modo que se exigirmos normalização

$$\int_V d^3 r \psi^{\dagger(+)} \psi^{(+)} = N^2 \int_V d^3 r (\chi^\dagger \eta^\dagger) \begin{pmatrix} \chi \\ \eta \end{pmatrix} = 1, \quad (38)$$

teremos que

$$N = \sqrt{\frac{E_p + m}{2L^3 E_p}}. \quad (39)$$

Vale a pena então definimos

$$u(\mathbf{p}, s) = \sqrt{E_p + m} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_p + m} \end{pmatrix} \chi^{(s)}, \quad (40)$$

como um *spinor de Dirac* de energia positiva. Aqui s se refere ao spin, ou seja, $s = \pm \frac{1}{2}$. Se escolhermos quantizar o spin na direção z , por exemplo,

$$\chi^{\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad e \quad \chi^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (41)$$

Por fim, a solução positiva é dada por

$$\psi_{p,s}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2E_p L^3}} u(\mathbf{p}, s) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}. \quad (42)$$

Para a solução negativa o procedimento é completamente análogo, mas dessa vez fazemos $E = -E_p$, de modo que obtém-se que

$$\psi_{-p,-s}^{(-)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2E_p L^3}} v(\mathbf{p}, s) e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}, \quad (43)$$

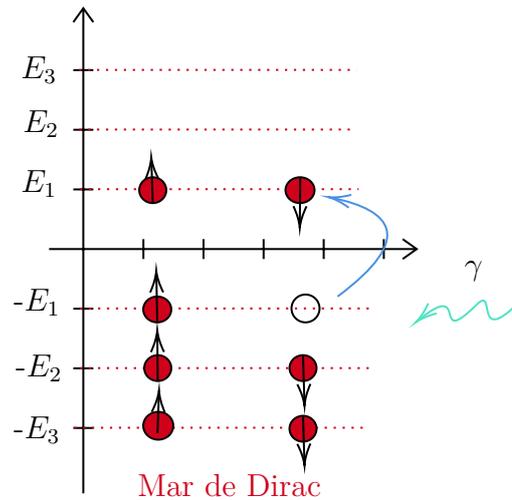


Figura 1: Teoria do buraco de Dirac (“*Hole Theory*”). Quando um fóton excita o mar de Dirac, um elétron é promovido deixando um buraco para trás, que se comporta como uma partícula com mesmas propriedades do elétron, mas com carga positiva.

onde

$$v(\mathbf{p}, s) = \sqrt{E_p + m} \begin{pmatrix} \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E_p + m} \\ 1 \end{pmatrix} (-i\sigma_2)\chi^{(s)}, \quad (44)$$

é o *spinor de Dirac* de energia negativa.

Como interpretar a existência dessas soluções negativas? O próprio Dirac conseguiu fornecer uma interpretação⁸. Imagine que no mundo como o conhecemos os estados de energia negativa estão todos preenchidos, daí se evocarmos o princípio de exclusão de Pauli, os elétrons que estão ocupando os estados positivos não podem decair para os negativos. Esses estados negativos ocupados formam então o que se convencionou chamar de *mar de Dirac*. Isso explica porque os elétrons não decaem indefinidamente para estados de energia cada vez mais negativas. Contudo, uma consequência importante emerge desta construção. Suponha que esse “mar” de estados negativos seja excitado por um fóton com energia suficiente para promover um elétron para um dado estado de energia positiva. Ao ser promovido, esse elétron deixa um estado desocupado para trás, ou um *buraco* como é usualmente dito. Esse buraco se comporta exatamente como um elétron de energia positiva mas com *carga positiva*! Ou seja, um outra partícula. Apesar de alguma resistência inicial, Dirac admitiu que sua teoria estava prevendo um novo tipo de partícula, que mais tarde ficou conhecida como *pósitron*, já que possuía as mesmas propriedades do elétron mas com carga positiva.

Três anos após a previsão de Dirac, Carl David Anderson descobriu o pósitron fazendo experimentos para estudar raios cósmicos utilizando uma câmara de nuvens [31]. Apesar de ter sido bem sucedida na época, a interpretação de Dirac foi substituída por outras que vieram com o avanço das teorias quânticas de campos, já que dentre outros problemas

⁸ Uma exposição breve e bastante clara foi feita pelo próprio Dirac em sua *Nobel Lecture* [30].

ela se baseava fortemente no princípio de exclusão de Pauli, e hoje sabemos que bósons também possuem suas antipartículas.

2.5 Simetrias

Nesta seção exploraremos as *simetrias* da Equação de Dirac. Diremos que ela possui uma simetria em relação a uma dada operação (transformação), se ela se mantiver invariante após essa operação. Em outras palavras, se fizermos uma rotação, reflexão, mudarmos de referencial, etc., e a equação preservar a sua forma, diremos que ela é simétrica em relação a essa operação.

Como o objetivo é desenvolver uma teoria relativística, uma simetria fundamental que deve existir, se queremos ser bem sucedidos, é que a equação de Dirac se mantenha invariante quando mudamos de um referencial inercial para outro no espaço de Minkowski. Na relatividade especial são as *transformações de Lorentz* (TL) que nos permitem fazer isso. Deixemos que as TL sejam tais que

$$x^\mu \rightarrow x'^\mu = \Lambda^\mu_\nu x^\nu, \quad (45)$$

e para a métrica

$$\Lambda^\mu_\rho g_{\mu\nu} \Lambda^\nu_\sigma = g_{\rho\sigma}, \quad (46)$$

onde os elementos de matriz Λ^μ_ν são constantes reais.

Como a equação de Dirac e as TL são ambas lineares, é razoável supor que os spinores antes e depois da transformação se relacionem de maneira linear, ou seja, que exista uma representação para as TL $S_{ab}(\Lambda)$, tal que

$$\psi'_a(x') = S_{ab}(\Lambda)\psi_b(x), \quad (47)$$

onde os índices $a, b = 1, 2, 3, 4$ se referem às componentes do spinor. Consideraremos ainda, por simplicidade, o caso da partícula livre, ou seja, a ED na discussão desta seção é simplesmente

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0. \quad (48)$$

Para que a ED seja invariante sob TL $\psi'(x')$ deve satisfazer

$$(i\gamma^\mu \partial'_\mu - m)\psi'(x') = 0, \quad (49)$$

mas note que se multiplicarmos a equação (48) por S pela esquerda temos que

$$(iS\gamma^\mu S^{-1}\partial_\mu S - mS)\psi(x) = 0 \Rightarrow (iS\gamma^\mu S^{-1})\partial_\mu(S\psi(x)) - mS\psi(x) = 0, \quad (50)$$

onde usamos que $S\partial_\mu S^{-1} = \partial'_\mu$, já que $S(\Lambda)$ é uma representação das TL. De (47),

$$(iS\gamma^\mu S^{-1}\partial_\mu - m)\psi'(x') = 0. \quad (51)$$

Como ∂_μ se transforma como um covetor, da transformação (45), também é verdade que $\partial_\mu = \Lambda_\mu^\nu \partial'_\nu$ o que implica $\partial'_\nu = \Lambda_\nu^\mu \partial_\mu$. Assim, para recuperarmos a equação (49) é necessário que

$$S(\Lambda)\gamma^\mu S^{-1}(\Lambda) = \Lambda_\mu^\nu \gamma^\nu, \quad (52)$$

ou ainda, multiplicando pela esquerda por S^{-1} , pela direita por S e por fim por Λ_μ^ν pela esquerda novamente, temos

$$S^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu S(\Lambda) = \Lambda_\nu^\mu \gamma^\nu. \quad (53)$$

Esta última equação nos diz que γ^μ se transforma como um vetor de Lorentz, além disso ela nos fornece uma condição que nos permite construir a matriz $S(a)$, que representa as TL.

Por fim, vamos determinar a forma de $S(\Lambda)$. Consideremos transformações infinitesimais, tais que

$$\Lambda_\nu^\mu = \delta_\nu^\mu + \epsilon_\nu^\mu, \quad (54)$$

onde $\epsilon_{\mu\nu} = -\epsilon_{\nu\mu}$ é infinitesimal, de modo que em primeira ordem

$$S(\Lambda) = 1 - \frac{i}{4}\epsilon^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}, \quad (55)$$

onde $\sigma_{\mu\nu}$ são matrizes 4×4 antissimétricas e o fator constante está aí por conveniência. É possível mostrar [32, 33] que a condição (53) e as propriedades das matrizes gamma nos levam a

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{i}{4}[\gamma_\mu, \gamma_\nu], \quad (56)$$

onde $\sigma^{0j} = i\gamma^0\gamma^j$ e $\sigma^{ij} = i\gamma^i\gamma^j$, com $i \neq j$. Na representação de Dirac,

$$\sigma^{0j} \equiv i\alpha^j = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma^j \\ i\sigma^j & 0 \end{pmatrix} \quad (57)$$

e

$$\sigma^{ij} \equiv \epsilon^{ijk}\Sigma^k = \epsilon^{ijk} \begin{pmatrix} \sigma^k & 0 \\ 0 & \sigma^k \end{pmatrix}. \quad (58)$$

Assim, a ED é invariante sob TL como desejado, e a representação, $S(\Lambda)$, dessas transformações constitui-se de tensores antissimétricos com estreita relação com as matrizes de Pauli.

A próxima simetria importante que investigaremos é simetria de *conjugação de carga*. Voltemos à ED (desta vez com a presença do campo A_μ , já que ele é fundamental nas considerações que faremos)

$$[\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\psi(x) = 0, \quad (59)$$

se tomarmos seu complexo conjugado

$$[\gamma^{\mu*}(-i\partial_\mu - eA_\mu) - m]\psi^*(x) = 0, \quad (60)$$

perceba que na representação de Dirac⁹ apenas γ^2 possui elementos complexos, de modo que $\gamma^2 = -\gamma^{2*}$ e $\gamma^\nu = \gamma^{\nu*}$ ($\nu \neq 2$), daí multiplicando pela esquerda por $-i\gamma^2$ e lembrando da relação de anti-comutação (18), tem-se que

$$[\gamma^\mu(\partial_\mu + eA_\mu) - m]i\gamma^2\psi^*(x) = 0. \quad (61)$$

Se definirmos então uma operação de conjugação $C \equiv i\gamma^2K$ (K atua conjugando o spinor), tal que

$$\psi_c \equiv C\psi = i\gamma^2\psi^*, \quad (62)$$

percebemos que ψ_c satisfaz

$$[\gamma^\mu(\partial_\mu + eA_\mu) - m]\psi_c(x) = 0, \quad (63)$$

que é exatamente a equação de Dirac para uma partícula com a mesma massa de antes mas com carga positiva. Daí o nome conjugação de carga. A operação C nos leva, deste modo, do spinor da partícula ψ ao spinor de sua anti-partícula ψ_c .

Outra simetria importante é a de *reversão temporal*. Ela se refere ao fato de que leis físicas, como a 2ª lei de Newton, por exemplo, permanecem válidas se considerarmos o tempo como fluindo ao contrário, ou seja, são invariantes após a transformação $t \rightarrow -t$. Vejamos como essa simetria se manifesta no caso da equação de Dirac. Fazendo $t \rightarrow -t$ na equação complexo conjugada da ED, tem-se que¹⁰

$$(-i\gamma^{\mu*}\partial'_\mu - m)\psi^*(x) = [-i(-\gamma^{0*}\partial_0 + \gamma^{i*}\partial_i) - m]\psi^*. \quad (64)$$

Daí, se $\mathcal{T}\psi = A\psi^*$ é a ação do operador de reversão temporal \mathcal{T}^{11} , encontra-se a condição

$$A^{-1}(-i\gamma^{\mu*})A = i\gamma^0\gamma^\mu\gamma^0, \quad (65)$$

que é satisfeita se $A = i\gamma^1\gamma^3$. Por fim,

$$\mathcal{T}\psi = i\gamma^1\gamma^3\psi^*, \quad (66)$$

satisfaz a equação de Dirac. De modo análogo, podemos mostrar que após uma transformação de paridade \mathcal{P} em que $\vec{x} \rightarrow -\vec{x}$, o spinor $\mathcal{P}\psi = \gamma^0\psi$ satisfaz a ED.

As simetrias de conjugação de carga, reversão temporal e paridade são chamadas de *discretas* e simetrias como a invariância pelas transformação de Lorentz são chamadas de simetrias *contínuas*.

Nas últimas décadas, o protagonismo das simetrias no estudo das leis física tem se tornado cada vez maior. Um exemplo de conclusões importantes que podemos retirar

⁹ Aqui, por brevidade e simplicidade considerou-se essa representação em particular, mas os resultados são gerais como pode-se ver nas referências [33, 34].

¹⁰ Rígorosamente, a equação (64) fixa uma condição para A que é dada a menos de uma fase. Aqui sempre que foi necessário adotamos essa fase como igual a 1 por convenção e simplicidade.

¹¹ O operador \mathcal{T} é um operador *anti-linear*.

da existência de simetrias são as leis de conservação, que por sua vez constituem pilares da física clássica e moderna. A teoria de Dirac também pode ser construída a partir do estudo da Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi, \quad (67)$$

onde ψ aqui é pensada como um campo, o campo de Dirac. Através do Teorema de Noether conseguimos relacionar as simetrias desse campo à correntes e quantidades conservadas (mais sobre isso nos livros [35, 33, 36]):

- Translações espaço-temporais \implies momento e energia
- Transformações de fase \implies probabilidade
- Transformações de Lorentz \implies Momento angular (generalizado)

As simetrias do Teorema de Noether são contínuas, mas a importância das simetrias discretas não é menor. Na Teoria Quântica de Campos, um importante teorema, conhecido como *Teorema CPT*, estabelece¹² que todas as leis físicas devem ser invariantes por uma transformação simultânea de conjugação de carga, paridade e reversão temporal. Essa simetria fundamental, implica que podemos construir um universo “espelhado” em relação ao nosso se o refletirmos em relação a um dado plano, invertermos o momento de todas as partículas e trocarmos estas pelas suas anti-partículas, e este universo “espelhado” deve obedecer exatamente as mesmas leis físicas que o nosso. Além disso, as simetrias discretas tem grande importância no estudo e descrição de sistemas em teorias de estado sólido.

2.6 Spin na Teoria de Dirac

Uma afirmação comum quando o assunto é a equação de Dirac, é que o spin emerge naturalmente na teoria, ou seja, não é necessário impor a sua existência nas equações como é feito nas teorias não-relativísticas. Nesta monografia também foi afirmado que ao permitir graus de liberdade que não fossem espaço-temporais na construção da equação, acabamos por incorporar o spin. Contudo, nem sempre fica claro como essa manifestação “natural” acontece. O objetivo dessa seção é fornecer uma maneira simples de confirmar que o campo de Dirac, ψ , naturalmente incorpora essa propriedade na sua descrição do elétron. Considere novamente as transformações $\Lambda_\nu^\mu = \delta_\nu^\mu + \epsilon_\nu^\mu$ infinitesimais tais que em primeira ordem

$$S(\Lambda) = 1 - \frac{i}{4}\epsilon^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}. \quad (68)$$

¹² Para os rigorosos, este teorema se refere às teorias quânticas de campos locais e invariantes por transformações de Lorentz, que possuam uma hamiltoniana hermitiana.

Daí, voltando em (47), podemos também reescrevê-la como

$$\psi'(x) = S(\Lambda)\psi(\Lambda^{-1}x), \quad (69)$$

de modo que para uma transformação infinitesimal de Λ e do campo,

$$\begin{aligned} \psi'(x) &= \left(1 - \frac{i}{4}\epsilon^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right)\psi(x^\lambda - \epsilon^\rho_\sigma x^\sigma) = \left(1 - \frac{i}{4}\epsilon^{\mu\nu}\sigma_{\mu\nu}\right)\left(1 - \frac{1}{2}\epsilon^{\mu\nu}L_{\mu\nu}\right)\psi(x) \\ &= \left[1 - \frac{i}{4}(L_{\mu\nu} + \frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu})\right]\psi(x), \end{aligned} \quad (70)$$

ou seja, $J_{\mu\nu} = L_{\mu\nu} + \frac{1}{2}\sigma_{\mu\nu}$ é o gerador das transformações de Lorentz. Onde $\sigma_{\mu\nu}$ corresponde à parte intrínseca da transformação, ou, em outras palavras, à parte que aparece devido ao fato de ψ ser um spinor. Enquanto que $L_{\mu\nu}$ corresponde à contribuição orbital da transformação, a transformação das coordenadas (ou ainda, da dependência funcional do espinor em relação as coordenadas).

Se considerarmos apenas a parte espacial das transformações, as rotações puras, os geradores J^k , L^k e Σ^k se tornam simplesmente o momento angular total, orbital e o spin, respectivamente, e satisfazem

$$J^k = \frac{1}{2}\epsilon^{ijk}(L_{ij} + \frac{1}{2}\sigma_{ij}) \equiv L^k + \Sigma^k. \quad (71)$$

Daí, tomando o quadrado do termo de spin,

$$\frac{1}{2}\Sigma \cdot \frac{1}{2}\Sigma = \left(\frac{1}{2}\sigma\right) \cdot \left(\frac{1}{2}\sigma\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{2}\right), \quad (72)$$

o que nos permite concluir que o spin do campo de Dirac é $s = \frac{1}{2}$.

Concluimos então que o spin aparece na teoria de Dirac devido à maneira com que spinors fazem rotações espaciais no espaço-tempo, e como esperado, constitui uma propriedade intrínseca do elétron que é completamente independente do sistema de coordenadas ou de como este se transforma.

Antes de prosseguir, vale a pena colocar que o aparecimento do spin *não* é um efeito relativístico, como está bem discutido na referência [37], mas sim resultado da linearização das equações de onda. Assim, por já ser linear a equação de Dirac de fato nos leva naturalmente ao spin, e o que uma teoria relativística nos fornece é uma maneira de interpretá-lo como sendo a propriedade que caracteriza a rotação espacial de um spinor no espaço-tempo.

2.7 Quantização do Campo de Dirac

Um detalhe importante que pode passar despercebido da interpretação de Dirac para as soluções negativas é que ela requer *muitas partículas (corpos)* para funcionar. Ou seja,

mesmo em sua interpretação mais elementar, a equação de Dirac exige a existência de muitas partículas para fazer sentido. Este fato sugere uma reformulação da teoria que leve em conta esse característica fundamental. A estratégia tradicional é passar a pensar em ψ não como uma função de onda mas como um *campo*, o *campo de Dirac*.

No nosso estudo das simetrias da ED foi dito que podemos construir a teoria de Dirac partindo da lagrangiana

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi. \quad (73)$$

Podemos recuperar a equação de Dirac e sua adjunta se resolvermos as equações de Euler-Lagrange para o campo ψ

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\psi} - \partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\psi)} = \bar{\psi}(i\gamma^\mu\partial_\mu - m) + \partial_\mu\bar{\psi}i\gamma^\mu \quad (74)$$

$$= -i\partial_\mu\bar{\psi}\gamma^\mu - m\bar{\psi}, \quad (75)$$

e para $\bar{\psi}$

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\bar{\psi}} - \partial_\mu\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu\bar{\psi})} = (i\gamma^\mu\partial_\mu - m)\psi. \quad (76)$$

Para construirmos a hamiltoniana primeiro determinamos os momentos conjugados

$$\pi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_0\bar{\psi})} = \frac{-i}{2}\gamma^0\psi, \quad (77)$$

e

$$\bar{\pi} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_0\psi)} = \frac{i}{2}\bar{\psi}\gamma^0 = \frac{i}{2}, \psi^\dagger \quad (78)$$

perceba que $\bar{\pi}$ é uma linha e π é uma matriz coluna. A densidade hamiltoniana, \mathcal{H} é então dada por

$$\mathcal{H} = \bar{\pi}\partial_0\psi + \partial_0\bar{\psi}\pi - \mathcal{L} = \psi^\dagger\left(\frac{-i}{2}\alpha_i\overleftrightarrow{\partial}_i + \beta m\right)\psi, \quad (79)$$

onde \leftrightarrow indica que $\overleftrightarrow{\partial}_i$ atua para os dois lados, ou seja, $\psi^\dagger\overleftrightarrow{\partial}_i\psi \equiv \psi^\dagger\overrightarrow{\partial}_i\psi - \psi^\dagger\overleftarrow{\partial}_i\psi$. Temos então que a hamiltoniana é dada por

$$H = \int d^3r\mathcal{H} = \int[\psi^\dagger\frac{-i}{2}\alpha_i\overleftrightarrow{\partial}_i\psi + \psi^\dagger\beta m\psi], \quad (80)$$

que, utilizando integração por partes e assumindo que ψ vai a zero no infinito, nos leva a

$$H = \int d^3r\psi^\dagger[-i\alpha_i\partial_i + \beta m] = \int d^3r\psi^\dagger H_D\psi. \quad (81)$$

Até aqui o tratamento que demos a ψ foi o de um campo clássico. Como a teoria que queremos construir é quântica, vamos transformar ψ em operador expandindo-a da seguinte maneira: Sejam $\psi_{p,s}^{(+)}$ e $\psi_{-p,-s}^{(-)}$ soluções da equação de Dirac livre, fazemos

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n,s}[b_{n,s}\psi_{p,s}^{(+)} + d_{n,s}^\dagger\psi_{-p,-s}^{(-)}], \quad (82)$$

e

$$\bar{\psi}(\mathbf{r}) = \sum_{n,s} [\bar{\psi}_{p,s}^{(+)} b_{n,s}^{\dagger} + \bar{\psi}_{-p,-s}^{(-)} d_{n,s}], \quad (83)$$

onde $b_{n,s}^{\dagger}$ e $d_{n,s}^{\dagger}$ criam, respectivamente, uma *partícula* e uma *antipartícula* com *spin* s e *momento* p_n . E, $b_{n,s}$ e $d_{n,s}$ destroem, respectivamente, uma *partícula* e uma *antipartícula* com *spin* s e *momento* p_n .

Substituindo as expressões (82) e (83) em (81) e lembrando que $\psi_{p,s}^{(+)}$ e $\psi_{-p,-s}^{(-)}$ são autofunções de H_D , chegamos em

$$H = \sum_{n,s} E_n (b_{n,s}^{\dagger} b_{n,s} - d_{n,s} d_{n,s}^{\dagger}), \quad (84)$$

perceba que a natureza do campo de Dirac é quântica, uma vez que caso $b_{n,s}^{\dagger}$ e $d_{n,s}^{\dagger}$ e seus transpostos conjugados fossem números complexos ao invés de operadores, a hamiltoniana não seria positiva definida. Ou seja, não é possível construir uma teoria clássica para o campo de Dirac. No caso quântico, para garantir H positiva definida, exigimos

$$\{b_{n,s}, b_{n',s'}^{\dagger}\} = \delta_{n,n'} \delta_{s,s'} \quad \{d_{n,s}, d_{n',s'}^{\dagger}\} = \delta_{n,n'} \delta_{s,s'}. \quad (85)$$

Essas relações de anti-comutação fazem com que as partículas descritas pelo campo de Dirac obedecem uma estatística de *Fermi-Dirac*. Mas, das relações de anti-comutação

$$d_{n,s}^{\dagger} d_{n,s} = 1 - d_{n,s} d_{n,s}^{\dagger}, \quad (86)$$

o que implica

$$H = \sum_{n,s} E_n (b_{n,s}^{\dagger} b_{n,s} + d_{n,s}^{\dagger} d_{n,s}) - \sum_{n,s} 1. \quad (87)$$

Perceba que o último termo fornece uma contribuição infinita e negativa para a energia. O que fazemos é atribuir essa energia ao vácuo, e já que apenas variações de energia possuem significado físico é como se estivéssemos escolhendo uma referências para as medições de energia. Note que existe uma similaridade interessante entre a interpretação deste termo de energia negativa e a hipótese de Dirac, da existência do mar de Dirac. Na interpretação dele o mar de Dirac possuiria infinitos estados de energia negativa, ou seja, também teria energia negativa e infinita e cumpriria o papel que aqui estamos atribuindo ao vácuo.

Assim, descartando o termo que se refere ao vácuo temos finalmente que o operador hamiltoniano é dado por

$$H = \sum_{n,s} E_n (b_{n,s}^{\dagger} b_{n,s} + d_{n,s}^{\dagger} d_{n,s}). \quad (88)$$

Vale comentar por fim que utilizando as relações de anti-comutação (85), podemos estabelecer as seguintes relações para os operadores de campo do campo de Dirac

$$\{\psi_a(t, \mathbf{r}), \psi_b^\dagger(t, \mathbf{r}')\} = \delta_{a,b}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (89)$$

que exercem o papel de relações de completudeza para as soluções de energia positiva e negativa da ED.

2.8 O limite não relativístico da Equação de Dirac

Uma verificação importante quando se constrói uma teoria que pretende fornecer uma descrição mais geral para o comportamento de, por exemplo, um dado tipo de partículas, é se essa teoria recupera a física já bem estabelecida dos seus casos limites. No caso da equação de Dirac, é importante que no seu limite não relativístico a mecânica quântica baseada da equação de Schrödinger seja recuperada. Duas maneiras de fazer essa aproximação podem ser encontradas nas referências [36] e [14]. Em essência, ambas as derivações consistem em fazer uma transformação unitária nos spinores (que no limite não relativístico possuem duas componentes) e na hamiltoniana de Dirac e depois faz-se uma expansão desta última, de modo que ao final obtemos

$$H_{NR} = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + e\phi - \frac{p^4}{8m^3} - \frac{e\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{2m} + \frac{e\nabla^2\phi}{8m^2} + \frac{e}{4m^2r} \frac{d\phi}{dr} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}, \quad (90)$$

aqui os dois primeiros são as bem conhecidas contribuições da energia cinética e do potencial. O terceiro, quinto e sexto termos dão contribuições que originam a chamada *estrutura hiperfina* do espectro de energia. O terceiro se refere à variação da massa com a velocidade, prevista pela relatividade restrita, o quinto é chamado *termo de Darwin* e se refere à flutuações quânticas na posição do elétron (que aparece por causa da expansão que fizemos) e o sexto é o bem conhecido termo de *spin órbita* e aparece devido ao acoplamento do momento magnético do elétron com o campo magnético que ele enxerga ao se mover, como também prevê a relatividade restrita. Por fim, o quarto termo se refere ao acoplamento do spin do elétron com campos magnéticos externos e dá origem ao chamado *efeito Zeeman*.

Essa hamiltoniana corresponde ao esperado pela teoria não-relativística, mas com a vantagem de que os termos hiperfinos e de acoplamento com campo magnético externo aparecem naturalmente, o que nos diz que a teoria de Dirac é bem sucedida em recuperar o caso não relativístico.

Os Isolantes Topológicos e a Equação de Dirac

3.1 Isolantes Topológicos

A estrutura eletrônica de um dado sistema corresponde, em teorias do estado sólido, aos intervalos de energias possíveis para os elétrons do sistema, e são normalmente caracterizadas pela relação de dispersão $E(\mathbf{k})$ (\mathbf{k} é o vetor de onda). Ela é determinada pelo comportamento coletivo dos elétrons do sistema e sua interação com os íons que o compõem (é comum desprezar as interações elétron-elétron). Como resultado desse comportamento coletivo, formam-se regiões contínuas de energias permitidas para os elétrons do sólido. A essas regiões damos o nome de *bandas de energia*.

Nas bandas eletrônicas de materiais Isolantes existe um *gap*¹ que separa a banda eletrônica ocupada de mais alta energia (usualmente chamada de banda de valência) e a banda desocupada de menor energia (conhecida como banda de condução), veja figura 2. Esse *gap* impede que os elétrons tenham acesso à banda de condução, o que implica, como o nome da banda sugere, que não há condução elétrica.

Isolantes Topológicos são materiais em que as bandas eletrônicas no *bulk*² se comportam exatamente como num isolante tradicional, mas, em suas bordas, esses materiais apresentam bandas eletrônicas onde não há *gap*, de modo que os elétrons podem transitar entre a banda de valência e banda de condução, o que torna possível a existência de estados metálicos nessas regiões. Esses estados são especiais pois são protegidos pela simetria de reversão temporal³. O que significa que desde que essa simetria seja preservada, eles não podem ser destruídos. A existência desses estados metálicos de borda protegidos pela simetria do sistema tornou esses materiais fonte de grande interesse pela comunidade cien-

¹ Esse e outros termos muito comuns na literatura e que não possuem uma tradução amplamente utilizada e aceita, serão mantidos no original em inglês.

² Podemos pensar nesse *bulk* como o “interior” do material, que na sua descrição é tomado como infinito, para que seja possível usar condições periódicas de contorno.

³ Outras simetrias são possíveis, mas essa é a mais comum.

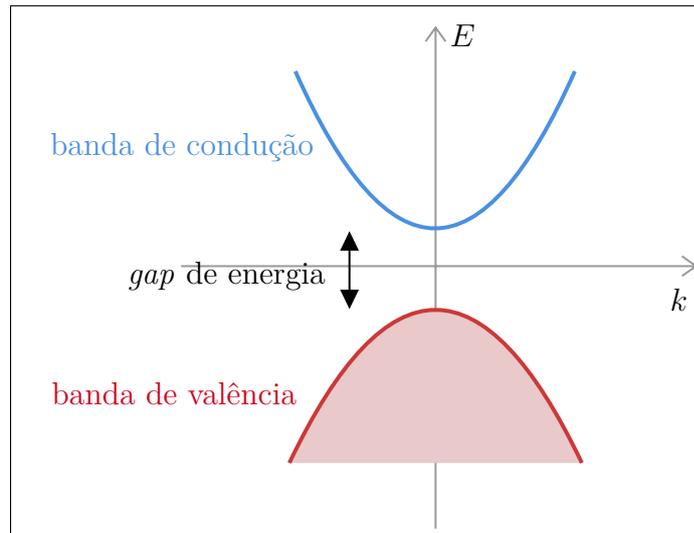


Figura 2: Figura ilustrativa de uma possível relação de dispersão para um isolante fictício. Perceba que há um *gap* entre a banda de condução e a de valência, a presença desse *gap* define um isolante.

tífica e tecnológica, já que impurezas e defeitos (que não quebrem a simetria que protegem os estados) não afetariam as propriedades que emergem da existência deles.

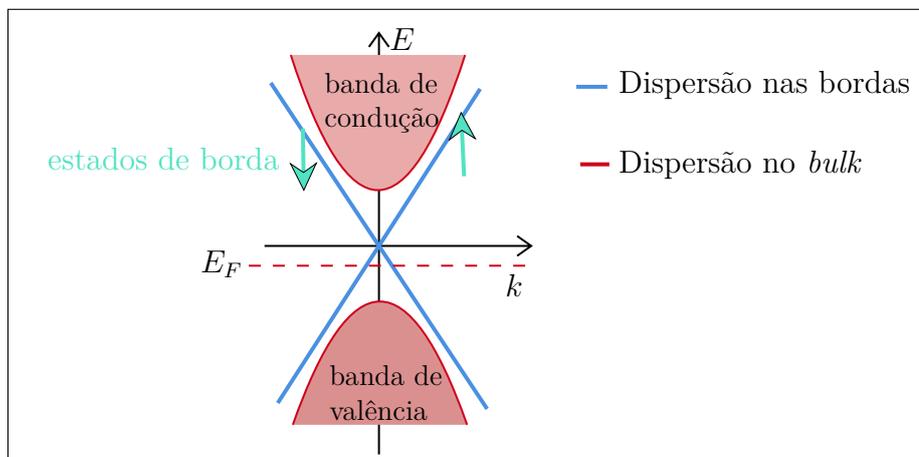


Figura 3: Ilustração da estrutura de bandas de um Isolante Topológico.

Mas afinal, o que há de topológico nos Isolantes topológicos? Para os propósitos desta monografia nos contentaremos em pensar que a *topologia é a área da matemática que estuda objetos que são equivalentes a menos de uma deformação*. O exemplo mais famoso de como essa equivalência se manifesta é o da caneca e a rosquinha. Como ambas só possuem um buraco, podem ser deformadas de forma a se tornarem a outra. Um outro possível exemplo é que uma vaquinha (de pelúcia, ou seja, sem buracos) pode ser deformada em uma esfera que também não possui buracos, Figura 4.

Perceba então que nesses objetos há uma propriedade topológica, a quantidade de buracos (ou *genus* g), que é preservada após a deformação. É nesse sentido que denomi-



Figura 4: Imagens produzidas por Keenan Crane [1]. Uma vaca idealizada (sem buracos) é topologicamente equivalente a uma esfera.

namos alguns materiais de “topológicos”. A estrutura eletrônica do *bulk* nesses materiais pode, em geral, ser caracterizada por quantidades que são invariantes, desde que certas simetrias, como a de reversão temporal, sejam preservadas. O valor que essas quantidades possuírem irão determinar se a topologia é trivial ou não. Ter uma topologia trivial significa que as bandas eletrônicas do material podem ser deformadas suavemente em bandas de um isolante comum, ou seja esses materiais são equivalentes aos isolantes tradicionais. Nos casos de topologia não trivial isso não é possível e uma gama de propriedades interessantes emerge.

Estendendo a analogia para algo quantitativo, evocamos o chamado *Teorema de Gauss-Bonnet* cuja ideia central se resume ao fato de que se integrarmos a Curvatura Gaussiana de um objeto (mais precisamente uma *variedade* M) sem bordas por toda a sua superfície o resultado é $4\pi(1 - g)$, ou ainda

$$\int_M \kappa dS = 4\pi(1 - g), \quad (91)$$

onde κ é a Curvatura Gaussiana da variedade considerada. Esse resultado nos diz que mesmo que façamos deformações locais na geometria da variedade, quando integrarmos sobre toda ela o resultado permanecerá o mesmo, desde que não adicionemos buracos.

Em materiais, o análogo à curvatura é o chamado *Potencial de Berry* ($\mathbf{A}(\mathbf{R})$) (\mathbf{R} é um parâmetro arbitrário) e o análogo da variedade é a Zona de Brillouin (célula primitiva de menor volume no espaço recíproco). Uma explicação didática bastante interessante sobre o Potencial e a Fase de Berry e a sua relação com isolantes topológicos pode ser encontrada em [38], mas para a nossa discussão basta a ideia a central.

Se considerarmos uma hamiltoniana $H(\mathbf{R})$ que depende de um conjunto de parâmetros representados por \mathbf{R} , caso $H(\mathbf{R})$ varie lentamente em relação a esses parâmetros, se o sistema começar em um dado auto-estado inicial $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ ele continuará no mesmo auto-estado $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$ em um instante posterior⁴ a menos de uma fase $\theta(t)$, ou seja, estará em $|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta(t)} |n(\mathbf{R}(t))\rangle$. É possível mostrar (veja referência [38], por exemplo) que

⁴ Perceba que o auto-estado pode evoluir no tempo, de modo que o sistema estará na versão “instantânea” do auto-estado inicial.

essa fase é dada por:

$$\theta(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\mathbf{R}(t')) dt' - i \int_0^t \left\langle n(\mathbf{R}(t')) \left| \frac{d}{dt'} \right| n(\mathbf{R}(t')) \right\rangle dt' , \quad (92)$$

onde o primeiro termo é simplesmente a fase que obtemos convencionalmente com a propagação temporal e o segundo da origem à chamada *Fase de Berry* definida por:

$$\gamma_n = i \int_0^t \langle n(\mathbf{R}(t')) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}(t')) \rangle \frac{d\mathbf{R}}{dt'} dt' = \int_{\mathbf{R}_0}^{\mathbf{R}_t} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) d\mathbf{R}, \quad (93)$$

onde $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ é o Potencial de Berry.

Nos casos em que estamos interessados esse espaço de parâmetros é a Zona de Brillouin (resumindo, $\mathbf{R} = \mathbf{K}$, a nossa Hamiltoniana é função do vetor de onda), e quando integramos o Potencial de Berry sobre toda a Zona de Brillouin, ou seja, por um caminho fechado (condições de contorno periódicas), a fase de Berry é um invariante e dada por um inteiro múltiplo de 2π [39]. Essa última condição garante que sob uma *transformação de gauge* de $\mathbf{A}(\mathbf{R})$ o estado físico do sistema não é alterado quando o caminho percorrido é fechado. Ou seja, se o ganho de uma fase, inteira e múltipla de 2π vier acompanhada da transformação

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \chi(\mathbf{R}), \quad (94)$$

onde $\chi(\mathbf{R})$ é uma função arbitrária, a física do sistema não é alterada, que é o que se espera de uma transformação de gauge.

No que diz respeito às discussões posteriores, o que devemos entender aqui é que se transportamos lentamente um auto-estado pelo espaço recíproco ao redor de um anel, ao voltar à posição inicial este auto-estado terá ganhado uma fase devida somente à geometria do espaço recíproco, e essa fase será a mesma para qualquer que seja esse auto-estado.

Em isolantes tradicionais, ou seja, em casos de topologia trivial, a integral

$$\nu = \frac{\gamma_n}{\pi} = \oint \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) d\mathbf{R}, \quad (95)$$

é igual a 0. E, para topologia não trivial $\nu \neq 0$. Essa quantidade ν é por vezes chamada de *winding number* e é um invariante topológico comumente utilizado para caracterizar topologia de materiais. Em estudos sobre a condutância hall, a integral em (95) é feita sobre toda a ZB, enquanto que em Isolantes topológicos, quando há simetria de reversão temporal, ela é feita sobre *metade* da ZB. No primeiro caso o winding number está relacionado com o chamado *chern number* e no segundo com o *invariante* Z_2 .

Em matemática, o winding number conta quantas vezes uma curva fechada, que existe em um plano, circula (no sentido anti-horário) ao redor de um ponto. Em um material de topologia não trivial, ela conta o número de *vórtices* na ZB. Esses vórtices são pontos em que não é possível tornar, usando uma transformação de gauge, a função de onda do auto-estado que estamos considerando, uma função suave e que pode ser integrada usando o teorema de stokes. E, na prática, sempre que precisarmos calcular a integral na equação

(95), temos que circular esses vórtices. Sempre que isto é feito, é dada uma contribuição inteira para a fase de Berry. É nesse sentido que o winding number conta quantos destes vórtices estão presentes. Por isso, também é comum encontrar o winding number sendo denominado como *vorticidade*.

A discussão sobre a caracterização da topologia de materiais, e a sua classificação utilizando invariantes é bastante densa e ainda é tema pesquisa. Para os propósitos desta monografia já temos o suficiente, mas podemos encontrar mais sobre esse assunto, por exemplo, nas referências [39, 22]. Neste ponto é importante esclarecer que nas discussões promovidas aqui, não iremos classificar ou prever que um dado material ou sistema seja topológico, o que faremos é entender como a ED pode ser usada, com o conhecimento prévio de que trata-se de um sistema de topologia não-trivial, para descrever efetivamente as bandas das regiões próximas aos extremos (ou bordas no caso 3D) do sistema e os estados que podem existir nessas regiões.

3.2 Aplicação da equação de Dirac em Isolantes Topológicos

Nos últimos anos a teoria desenvolvida por Dirac tem se tornado tópico de interesse da física da matéria condensada, em especial na descrição de Isolantes topológicos. Isso se deu devido ao fato de que equações com uma estrutura muito similar a da equação de Dirac se mostraram muito úteis em descrições efetivas dos estados de borda que aparecem nesses materiais. Nas próximas seções o objetivo será fazer uma argumentação sobre como e porque a teoria de Dirac pode ser utilizada na compreensão do comportamento dessa classe de materiais e seguiremos, em grande medida, a abordagem do livro de S. Q. Shen [22].

Começamos lembrando da forma do hamiltoniano de Dirac. Nessa discussão, é conveniente deixar explícita a presença da velocidade da luz (c) na expressão para H_D . Temos:

$$H_D = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2. \quad (96)$$

Nas aplicações em estado sólido, faz-se a substituição $c \rightarrow v$, onde v é a velocidade de Fermi, de modo a obter

$$H_D = v\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mv^2, \quad (97)$$

que é hamiltoniano tipo-Dirac, com o qual trabalharemos. Note que para temperatura $T = 0$ a velocidade de fermi é uma espécie de velocidade limite para os elétrons do sólido, cumprindo um papel análogo ao da velocidade da luz no vácuo na relatividade restrita. A vantagem dessa argumentação para chegar em (97) é que nos aproveitamos da estrutura que a equação de Dirac já possui naturalmente. Contudo, é possível chegar

no hamiltoniano (97) ou em equações semelhantes utilizando o chamado *método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$* [40]. Note por fim que a equação que utilizaremos nas aplicações que se seguirão não é a equação de Dirac como construída historicamente por Dirac e também não é a sua aproximação não-relativística (90), que foi apresentada anteriormente, o que tem-se é uma versão que preserva a estrutura da equação mas com modificações que refletem o fato de estarmos estudando problemas do domínio da física da matéria condensada.

O objetivo central aqui é entender como e porque a equação de Dirac consegue descrever o comportamento dos Isolantes Topológicos. O primeiro passo é avaliar o tipo de propriedades que emergem da equação (97), onde fizemos apenas a modificação $c \rightarrow v$ em relação à expressão original. Se começarmos considerando o caso 1D, temos

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & -i\hbar\sigma_x\partial_x \\ -i\hbar\sigma_x\partial_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} mv^2\sigma_z & 0 \\ 0 & -mv^2\sigma_z \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0, \quad (98)$$

de modo que a ED se desacopla em duas equações da forma:

$$(-iv\hbar\partial_x\sigma_x + mv^2\sigma_z)\psi_A = 0 \quad (99)$$

$$(-iv\hbar\partial_x\sigma_x - mv^2\sigma_z)\psi_B = 0, \quad (100)$$

onde ψ_A e ψ_B são vetores com duas componentes. Assim, temos duas equações idênticas a menos da troca $m \rightarrow -m$. Perceba ainda que se junto com $m \rightarrow -m$ fizermos $\beta \rightarrow -\beta$ (que também satisfaz as relações de anti-comutação que definem a ED) a ED permanece invariante, o que evidencia a simetria entre partículas de massa positiva e negativa. Para analisarmos o problema, basta então considerarmos o hamiltoniano:

$$h(x) = iv\hbar\partial_x\sigma_x + m(x)v^2\sigma_z. \quad (101)$$

Adicionalmente, queremos considerar o caso onde há uma interface entre uma região de massa positiva e uma região de massa negativa. A primeira pode representar, por exemplo o vácuo e a segunda o material a ser descrito. Impomos então que

$$m(x) = \begin{cases} -m_1, & \text{se } x < 0 \\ m_2, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

onde m_1 e m_2 são constantes positivas. Em notação matricial, temos que resolver

$$\begin{pmatrix} mv^2 & -iv\hbar\partial_x \\ -iv\hbar\partial_x & -mv^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix}. \quad (102)$$

Propomos para $x > 0$,

$$\psi^+ = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1^+ \\ \phi_2^+ \end{pmatrix} e^{-\lambda+x}, \quad (103)$$

e obtemos

$$m_2 v^2 \phi_1^+ + i v \hbar \lambda_+ \phi_2^+ = E \phi_1^+ \quad (104)$$

$$i v \hbar \lambda_+ \phi_1^+ - m_2 v^2 \phi_2^+ = E \phi_2^+, \quad (105)$$

e daí,

$$\phi_1^+ = \frac{-i v \hbar \lambda_+}{m_2 v^2 - E} \phi_2^+, \quad (106)$$

e ainda, resolvendo o sistema de equações para λ_+ , chegamos em

$$\lambda_{\pm} = \pm \frac{\sqrt{m_2^2 v^4 - E^2}}{v \hbar}. \quad (107)$$

Perceba que se $E^2 > m_2^2 v^4$, as soluções serão exponenciais complexas e portanto se estenderão por todo o espaço. Como estamos interessados somente nas soluções que existem próximas a interface, o caso que nos interessa é aquele em que $m_2^2 v^4 > E^2$. Além disso, como queremos que a função de onda se anule no infinito, tomamos a solução positiva e ficamos por fim com

$$\phi_1^+ = -i \sqrt{\frac{m_2 v^2 + E}{m_2 v^2 - E}} \phi_2^+, \quad (108)$$

e por um procedimento análogo, para $x < 0$

$$\phi_1^- = -i \sqrt{\frac{m_1 v^2 - E}{m_1 v^2 + E}} \phi_2^-. \quad (109)$$

Daí, exigindo continuidade da solução

$$\begin{pmatrix} \phi_1^- \\ \phi_2^- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1^+ \\ \phi_2^+ \end{pmatrix}, \quad (110)$$

chega-se em

$$\sqrt{\frac{m_2 v^2 + E}{m_2 v^2 - E}} = \sqrt{\frac{m_1 v^2 - E}{m_1 v^2 + E}}, \quad (111)$$

e obtemos que $E = 0$. Ou seja, temos estados de borda para os quais $E = 0$, e a solução tem a forma

$$\psi(x) = N \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{\frac{m(x)vx}{\hbar}}, \quad (112)$$

de modo que após exigir normalização, nos leva a

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{vm_1m_2}{\hbar(m_1 + m_2)}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{\frac{|m(x)vx|}{\hbar}}. \quad (113)$$

Abaixo temos um gráfico de $|\psi|^2$:

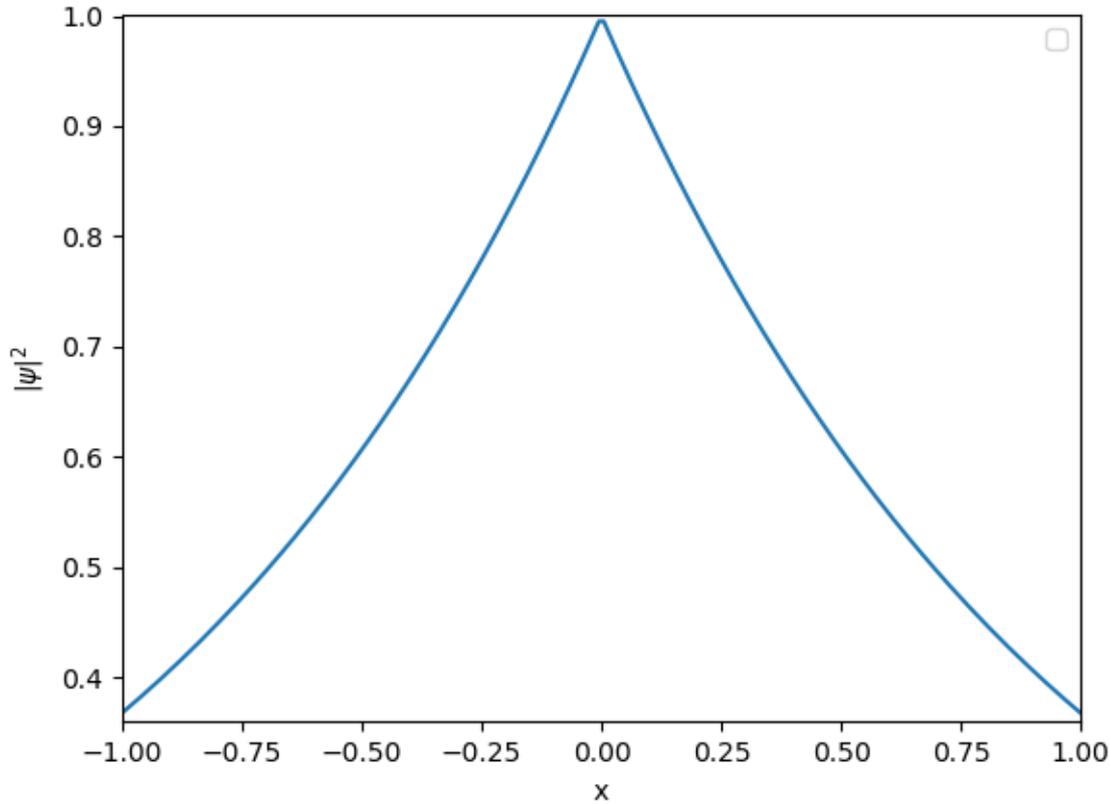


Figura 5: Distribuição de probabilidade da solução para os estados de borda com energia $E=0$.

Com essa análise simples concluímos que a equação de Dirac para sólidos (97) por si só já nos leva a estados de borda e mostra potencial para aplicação no estudo de Isolantes Topológicos. As soluções da ED para esse problema de uma interface entre regiões de massa positiva e negativa são por vezes chamadas de *soluções de Jackiw-Rebbi*[41]. Perceba contudo que temos um problema aqui: Não é possível distinguir topologicamente as regiões de massa positiva e negativa. Existe uma simetria inerente à equação e que precisa ser quebrada caso desejemos realmente descrever materiais que possuem topologia não trivial. Como a análise do caso 1D já nos levou a existência de solução na interface e foi possível detectar uma necessidade de modificação da equação, o caso 2D e 3D não será tratado aqui. Contudo, é possível mostrar (por exemplo em [22]) que em duas dimensões vê-se o aparecimento de dois estados na interface e que a velocidade efetiva dos elétrons nesses estados nos diz que elétrons com spin opostos se movem em direções opostas, evidenciando que nessas soluções spin e momento estão conectados.

3.2.1 Introduzindo a correção quadrática

Para quebrar a simetria entre as regiões de massa positiva e negativa, introduziremos uma correção quadrática no hamiltoniano de Dirac. Passaremos a trabalhar então com:

$$H_D = v\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta(mv^2 - Bp^2), \quad (114)$$

onde B é uma constante. Vejamos como esse termo torna a equação de Dirac topologicamente não trivial. Considere novamente o caso 1D, em que o hamiltoniano que estamos interessados assume a forma

$$h(x) = vp_x\sigma_x + (mv^2 - Bp_x^2)\sigma_z. \quad (115)$$

Perceba que:

1. Se $p_x = 0$, o termo $mv^2\sigma_z$ irá determinar a orientação do spin. Se $m < 0$, o spin estará orientado para baixo e se $m > 0$ o spin estará orientado para cima.
2. Se $p_x \rightarrow \infty$, o termo $-Bp_x^2\sigma_z$ irá determinar a orientação do spin. Se $B > 0$, o spin estará orientado para baixo e se $B < 0$ o spin estará orientado para cima.

Agora, observemos os casos:

- (i) $mB < 0 \Rightarrow m < 0$ e $B > 0$ ou $m > 0$ e $B < 0$, ou seja, nesse caso, a medida que vamos de 0 a ∞ no eixo p_x , não há inversão de orientação.

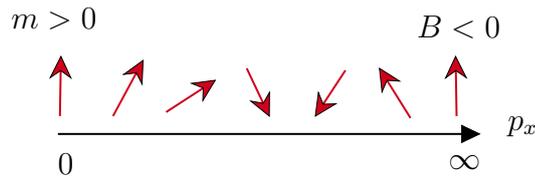


Figura 6: Caso trivial. Não há inversão de spin.

- (ii) $mB > 0 \Rightarrow m < 0$ e $B < 0$ ou $m > 0$ e $B > 0$. Nesse caso nos limites $p_x \rightarrow 0$ e $p_x \rightarrow \infty$ o spin tem sentido oposto. Ele rotaciona a medida que andamos de 0 a ∞ em p_x .

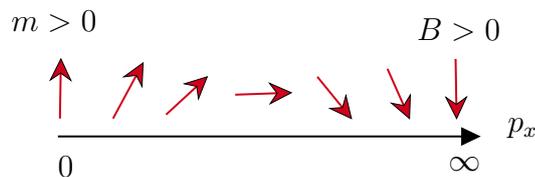


Figura 7: Caso não-trivial. Há inversão de spin ao andarmos de 0 a ∞ no eixo p_x

Note que inverter a orientação do spin, corresponde a ganhar uma fase de π . Ou seja, se, por exemplo, fixar-se $B > 0$, podemos concluir que ao percorrermos toda a região de massa positiva teremos ganhado uma fase no final, e se o mesmo for feito na região de massa negativa não há o aparecimento dessa fase. Da discussão sobre a fase de Berry sabemos que isso significa que as duas regiões são portanto topologicamente distintas. Nesse sentido, a correção quadrática introduzida se mostra promissora.

3.2.2 Estados de borda da equação modificada

Consideremos uma cadeia semi-infinita ($x \geq 0$). Na borda, isto é, em $x = 0$ exigimos como condição de contorno que a função de onda se anule. A ideia é investigar como ficam as soluções de energia zero nas proximidades desta borda.

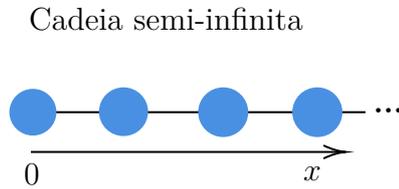


Figura 8: Ilustração de uma cadeia semi-infinita.

O problema que temos que resolver é:

$$\left[\begin{pmatrix} 0 & vp_x\sigma_x \\ vp_x\sigma_x & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (mv^2 - Bp_x^2)\sigma_z & 0 \\ 0 & -(mv^2 - Bp_x^2)\sigma_z \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix} = 0, \quad (116)$$

mas que se resume, desacoplando-se as equações a encontrar as soluções para

$$[vp_x\sigma_x + (mv^2 - Bp_x^2)\sigma_z]\phi(x) = 0, \quad (117)$$

onde $\phi(x)$ é novamente um vetor com duas componentes.

Se escolhermos quantizar o spin na direção y , de modo que $\phi(x)$ seja autofunção de σ_y , podemos escrever $\phi(x) = f_\eta\varphi(x)$ (f_η corresponde ao grau de liberdade do spin) de modo que

$$\sigma_y f_\eta = \eta f_\eta, \quad (118)$$

com ($\eta = \pm 1$). Atuando com σ_x pela esquerda vem que

$$\partial_x \varphi(x) = -\frac{1}{v\hbar}(mv^2 + B\hbar^2 \partial_x^2)\sigma_y \varphi(x), \quad (119)$$

e daí,

$$\partial_x \varphi(x) = -\frac{\eta}{v\hbar}(mv^2 + B\hbar^2 \partial_x^2)\varphi(x). \quad (120)$$

Se agora supormos $\varphi(x) \propto e^{-\lambda x}$, temos que

$$B\hbar^2 \lambda^2 - \eta v\hbar \lambda + mv^2 = 0, \quad (121)$$

e após alguns cálculos algébricos, obtemos que

$$\lambda_{\pm} = \frac{v}{2B\hbar}(\eta \pm \sqrt{1 - 4Bm}), \quad (122)$$

e notamos que essas raízes satisfazem

$$\lambda_+ + \lambda_- = \eta v / \hbar B \quad \text{e} \quad \lambda_+ \lambda_- = mv^2 / B\hbar^2. \quad (123)$$

Impondo que a função de onda se anula nas bordas temos então que $\lambda_{\pm} > 0 \Rightarrow \lambda_- \lambda_+ > 0 \Rightarrow \frac{\eta v}{\hbar B} > 0 \Rightarrow \eta = \text{sgn}(B)$, e essa igualdade é satisfeita por apenas uma das f_{η} . Temos por fim, que se $mB > 0$, temos uma solução para o estado de borda com energia zero:

$$\phi_{\eta} = \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ i \end{pmatrix} (e^{-\frac{x}{q_+}} - e^{-\frac{x}{q_-}}), \quad (124)$$

onde N é uma constante de normalização e $q_{\pm}^{-1} = \frac{v}{2|B|\hbar}(1 \pm \sqrt{1 \pm 4mB})$, e os q_{\pm} 's são fatores que irão nos informar como é a distribuição espacial da solução. Perceba que usamos o fato de que

$$f_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad (125)$$

são os autovetores de σ_y .

Abaixo um gráfico da distribuição de probabilidade dessa solução:

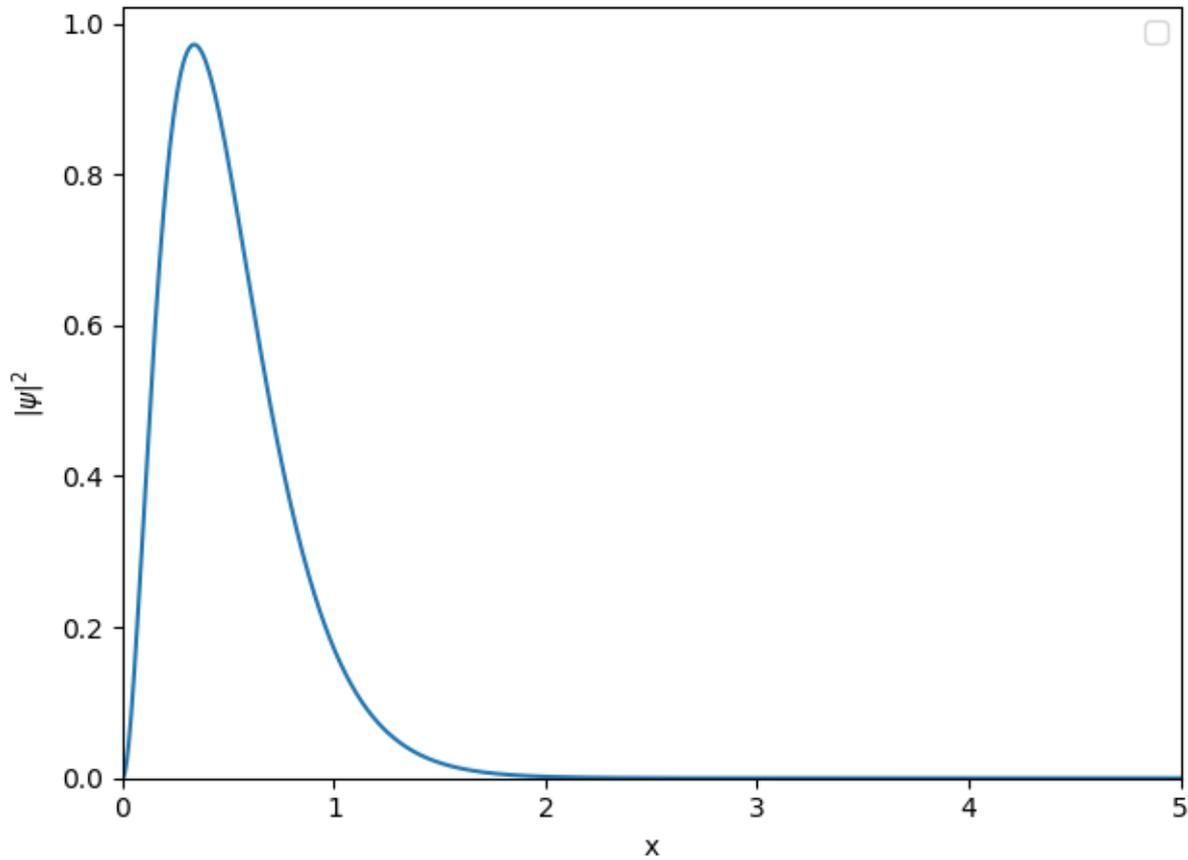


Figura 9: Distribuição de probabilidade da solução para os estados de energia nula, na equação de Dirac modificada.

Note que a distribuição de probabilidade prevalece perto da borda ($x=0$) e decai exponencialmente a medida que $x \rightarrow \infty$. Por fim, os spinores

$$\Psi_1 = \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-\frac{x}{a_+}} - e^{-\frac{x}{a_-}}), \quad (126)$$

e

$$\Psi_2 = \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-\frac{x}{a_+}} - e^{-\frac{x}{a_-}}), \quad (127)$$

são as duas soluções de mesma energia ($E=0$) para a hamiltoniana completa dada pela expressão (116). Para ver isso, basta atuar com o hamiltoniano nestas soluções e recuperar duas equações que são satisfeitas pela solução com duas componentes (124). A utilidade das soluções (126) e (127) não se encerra aqui. Elas serão importantes na discussão do caso 3D.

3.2.3 O caso 3D

Ainda nesta discussão bastante geral, vamos considerar, por fim, o caso tridimensional da ED modificada. Aqui, a borda é uma superfície ($x=0$, ou seja, plano yz) e note que nesse plano os momentos são bons números quânticos. A nossa estratégia para tratar o caso 3D será tomar a parte do hamiltoniano do caso 1D como a nossa situação não-perturbada e tratar os outros termos do hamiltoniano como perturbação. Note que o fato de que para $p_x = p_y = 0$ as soluções 1D e 3D serem idênticas nos sugerem essa abordagem. O problema que resolveremos é então:

$$H = vp_x\alpha_x + vp_y\alpha_y + vp_z\alpha_z - Bp_x^2\alpha_z - Bp_y^2\alpha_z - Bp_z^2\alpha_z + mv^2\alpha_z = H_{1D} + \Delta H_{3D}. \quad (128)$$

Daí, usamos as soluções do problema 1D transladadas em y e z , dadas por

$$\Psi_1 = \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ 0 \\ 0 \\ i \end{pmatrix} (e^{-\frac{x}{q_+}} - e^{-\frac{x}{q_-}}) e^{i\frac{(p_y y + P_z z)}{\hbar}}, \quad (129)$$

e

$$\Psi_2 = \frac{N}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ \text{sgn}(B) \\ i \\ 0 \end{pmatrix} (e^{-\frac{x}{q_+}} - e^{-\frac{x}{q_-}}) e^{i\frac{(p_y y + P_z z)}{\hbar}}, \quad (130)$$

como nossa base e a matriz da “perturbação” é dada por

$$\Delta H_{3D} = \begin{pmatrix} -B(p_x^2 + p_y^2) & 0 & vp_z & -ivp_y \\ 0 & -B(p_x^2 + p_y^2) & ivp_y & -vp_z \\ vp_z & -ivp_y & B(p_x^2 + p_y^2) & 0 \\ ivp_y & vp_z & 0 & -B(p_x^2 + p_y^2) \end{pmatrix}. \quad (131)$$

Para construir o hamiltoniano efetivo o procedimento é tomar

$$H_{eff} = (\langle \Psi_1 |, \langle \Psi_2 |) \Delta H_{3D} \begin{pmatrix} | \Psi_1 \rangle \\ | \Psi_2 \rangle \end{pmatrix}, \quad (132)$$

mas, aqui é interessante fazer transformação unitária

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_1\rangle - i|\Psi_2\rangle) = N \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ -i\text{sgn}(B) \\ 1 \\ i \end{pmatrix} (e^{-\frac{x}{q_+}} - e^{-\frac{x}{q_-}}) e^{i\frac{(p_y y + P_z z)}{\hbar}}, \quad (133)$$

e

$$|\Phi_2\rangle = (|\Psi_1\rangle + i|\Psi_2\rangle) = N \begin{pmatrix} \text{sgn}(B) \\ i\text{sgn}(B) \\ -1 \\ i \end{pmatrix} (e^{-\frac{x}{q_+}} - e^{-\frac{x}{q_-}}) e^{i\frac{(p_y y + P_z z)}{\hbar}}, \quad (134)$$

de modo que se agora sim tomarmos

$$H_{eff} = \left(\langle \Phi_1 |, \langle \Phi_2 | \right) \Delta H_{3D} \begin{pmatrix} | \Phi_1 \rangle \\ | \Phi_2 \rangle \end{pmatrix}, \quad (135)$$

temos então que

$$H_e = v \operatorname{sgn}(B)(p_y \sigma_y + p_z \sigma_z), \quad (136)$$

daí, para a relação de dispersão

$$\varepsilon_{p,\pm} = \pm v p \quad \text{onde } p = \sqrt{p_y^2 + p_z^2}, \quad (137)$$

ou seja, uma relação *linear* com o momento. Esta última relação nos leva ao famoso *Cone de Dirac*:

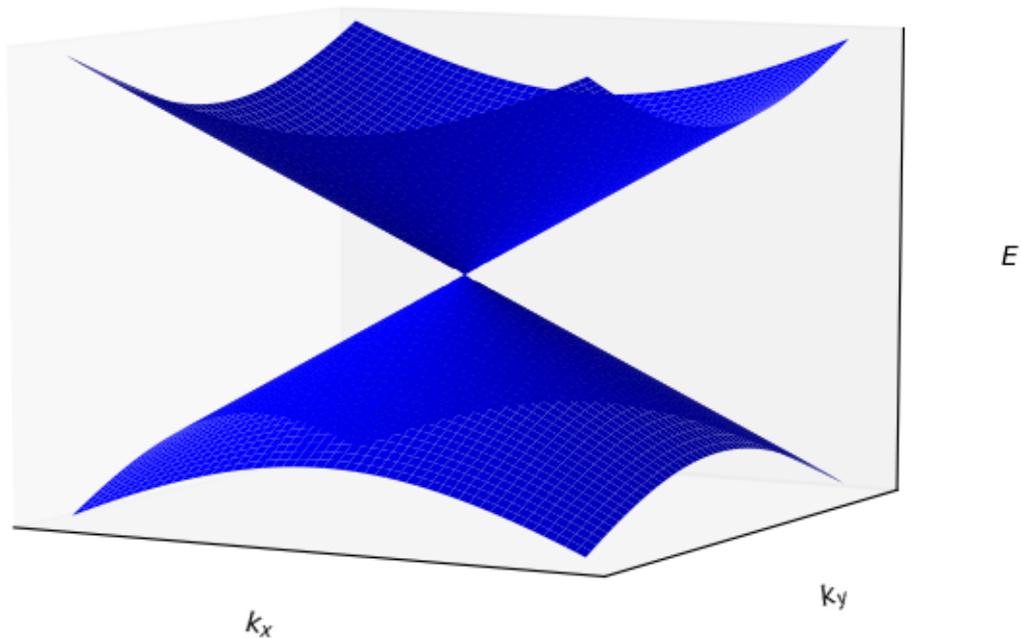


Figura 10: Cone de Dirac. Relação de dispersão do hamiltoniano efetivo próximo ao ponto $k=0$.

O aparecimento desse cone nas bandas de energia é característico dos Isolantes Topológicos e significa que os elétrons da banda de valência podem ocupar a banda de condução, tornando esse material condutor. Mas perceba que essa relação de dispersão se refere aos estados de borda, logo estamos descrevendo um material que só conduz nas bordas. Portanto, esse resultado nos permite concluir que com a correção quadrática a equação de

Dirac consegue descrever efetivamente os estados de borda de materiais tridimensionais e com topologia não-trivial. Aqui vale a pena frisar que na nossa discussão os estados de borda foram descritos, e não previstos. Ou seja, a informação sobre a existência dos estados de borda foi assumida como ponto de partida. Para prevê-los é necessário caracterizar a topologia do *bulk* e concluir que o material é não-trivial.

3.3 Modelo Efetivo para os Estados de Borda do Bi_2Se_3

Para encerrar a nossa incursão pela física dos Isolantes Topológicos, vamos considerar o uso da ED na descrição de um material real, o *Seleneto de Bismuto* (Bi_2Se_3). O Bi_2Se_3 já foi identificado e estudado experimentalmente como um Isolante Topológico [42, 43, 44]. Na estrutura de bandas de sua superfície foi identificada a presença de um cone de Dirac, e na estrutura do *bulk* há um gap de 0.3 eV , que é maior do que as energias das flutuações térmicas à temperatura ambiente, o tornando fonte de interesse para aplicações em dispositivos. Abaixo, figura (11), uma ilustração da sua estrutura cristalina romboédrica,

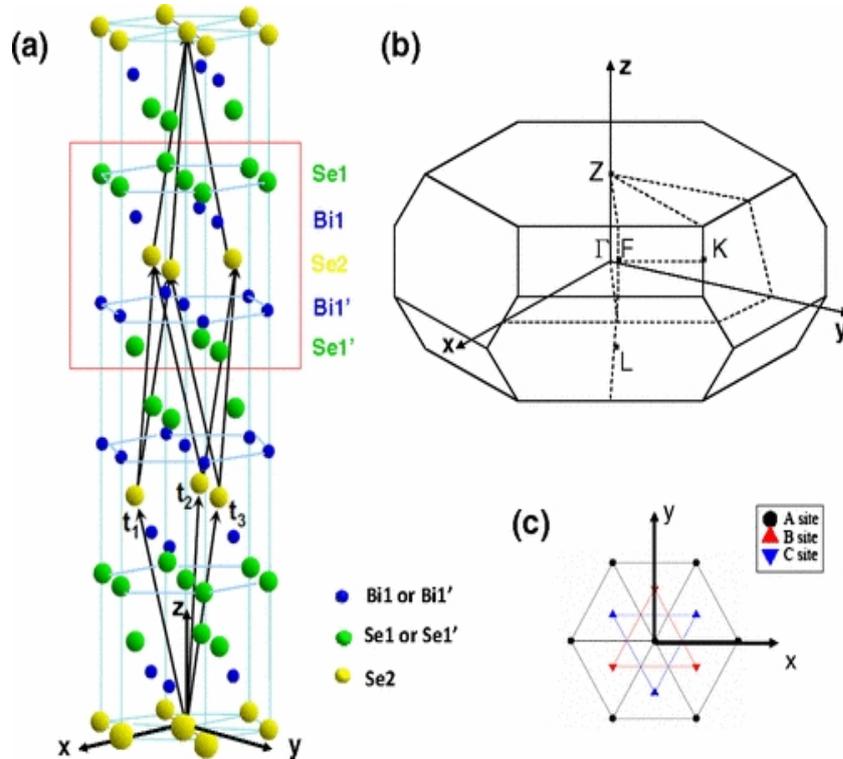


Figura 11: Adaptado da referência [2]. (a) Estrutura cristalina do Bi_2Se_3 . $t_1 = (\sqrt{3}a/3, 0, c/3)$, $t_2 = (-\sqrt{3}a/6, 2, c/3)$ e $t_3 = (-\sqrt{3}a/6, -a/2, c/3)$, onde a é o espaçamento da rede no plano $x - y$ e c é o espaçamento da rede ao longo da direção z . A camada quintupla é mostrada na caixa em vermelho com Se 1 – Bi1 – Se2 – Bi1' – Se1'. Se1 Be1 e Se 1' (Bi1') são equivalentes. (b) Zona de Brillouin do Bi_2Se_3 . (c) O triângulo no plano interno tem três posições possíveis A, B e C.

Se nos aproveitarmos do fato de que os orbitais p são predominantes próximo ao nível de Fermi e da existência de simetria de inversão no sistema (o que implica que os orbitais p_z dos átomos de Bi e Se tem paridades opostas), podemos construir um modelo efetivo [45] de baixas energias próximo ao ponto Γ (origem da ZB), na base dos orbitais p_z que é dada por $\{|P1_z^+, \uparrow\rangle, |P1_z^+, \downarrow\rangle, |P2_z^-, \uparrow\rangle, |P2_z^-, \downarrow\rangle\}$, onde \pm se refere à paridade e $\uparrow\downarrow$ se refere ao spin. Nessa base, e mantendo termos de até segunda ordem,

$$H = \epsilon(p) + \sum_{i=x,y,z} v_i p_i \alpha_i + \left(M - \sum_{i=x,y,z} B_i p_i^2 \right) \beta, \quad (138)$$

onde $v_x = v_y = v_{\parallel}$, $v_z = v_{\perp}$, $B_x = B_y = B_{\parallel}$, $B_z = B_{\perp}$ e $\epsilon(p) = C - D_{\parallel}(p_x^2 + p_y^2) - D_{\perp}p_z^2$. M se refere ao *gap* no ponto Γ e $B_{\parallel}, B_{\perp}, D_{\parallel}, D_{\perp}$ são parâmetros do modelo.

Se nos lembrarmos da definição dos γ_j , notamos que podemos representar o operador de conjugação de carga como $\mathcal{D}(\mathcal{C}) = i\beta\alpha_2$. No estudo de sólidos a simetria de conjugação de carga se expressa na forma da simetria de *partícula-buraco*, que se refere, grosseiramente, ao fato de que quando esta simetria está presente, elétrons e buracos obedecem as mesmas equações. Como o operador de conjugação de carga é anti-linear, podemos expressar a condição para existência da simetria de partícula-buraco como

$$\mathcal{D}(\mathcal{C})H^*(-\mathbf{p})\mathcal{D}(\mathcal{C})^{-1} = -H(\mathbf{p}), \quad (139)$$

e daí, é possível perceber que a presença do termo $\epsilon(p)$ quebra essa simetria. A perda dessa simetria deixa a descrição que procuramos aqui mais complicada do que os casos mais genéricos que discutimos anteriormente.

Esse é um modelo para o *bulk*, e vemos que mesmo neste caso a hamiltoniana (138) tem a forma de uma hamiltoniana tipo Dirac, e estudá-la pode nos levar a informações relevantes sobre o Bi_2Se_3 como Isolante Topológico. Contudo, a nossa discussão aqui será sobre um modelo efetivo para os estados de superfície.

Como queremos investigar a superfície, consideramos o plano $z = 0$ e percebe que neste caso p_x e p_y são bons números quânticos. O plano de ação aqui será determinar as soluções para o caso em que $p_x = p_y = 0$, e depois de modo semelhante ao feito para no caso 3D da discussão anterior, trataremos o caso $p_x, p_y \neq 0$ perturbativamente. Além disso, estaremos interessados no caso $D_{\perp}^2 < B_{\perp}^2$, que é o caso onde o *gap* não se fecha no *bulk*.

Para construir tal modelo, podemos nos aproveitar da hamiltoniana para o *bulk* (138). Fazendo $p_x = p_y = 0$, temos

$$H(z) = C + D_{\perp}\hbar^2\partial_z^2 - iv_{\perp}\hbar\partial_z\alpha_z + \left(M + B_{\perp}\hbar^2\partial_z^2 \right) \beta, \quad (140)$$

ou ainda,

$$H(z) = \begin{pmatrix} B_+ \hbar^2 \partial_z^2 + M & 0 & -i\hbar v_\perp \partial_z & 0 \\ 0 & B_+ \hbar^2 \partial_z^2 + M & 0 & i\hbar v_\perp \partial_z \\ -i\hbar v_\perp \partial_z & 0 & B_- \hbar^2 \partial_z^2 - M & 0 \\ 0 & i\hbar v_\perp \partial_z & 0 & B_- \hbar^2 \partial_z^2 - M \end{pmatrix}, \quad (141)$$

onde definimos $B_+ \equiv D_\perp + B_\perp$ e $B_- \equiv D_\perp - B_\perp$.

Perceba que as linhas 1 e 3 estão desacopladas das linhas 2 e 4, de modo que se tomarmos como *ansatz* os estados

$$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ b_1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{\lambda z} \quad e \quad |\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ a_2 \\ 0 \\ b_2 \end{pmatrix} e^{\lambda z}, \quad (142)$$

ficamos com duas equações matriciais independentes para resolver dadas por

$$\begin{pmatrix} M + B_+ \lambda^2 & -iv_\perp \lambda \\ -iv_\perp \lambda & -M + B_- \lambda^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \quad (143)$$

e

$$\begin{pmatrix} M + B_+ \lambda^2 & +iv_\perp \lambda \\ +iv_\perp \lambda & -M + B_- \lambda^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a_2 \\ b_2 \end{pmatrix}. \quad (144)$$

Onde, para simplificar a notação, permitimos que a constante \hbar fosse absorvida por λ .

Para resolver a primeira equação exigimos que

$$\det \begin{pmatrix} M + B_+ \lambda^2 - E & -iv_\perp \lambda \\ -iv_\perp \lambda & -M + B_- \lambda^2 - E \end{pmatrix} = 0, \quad (145)$$

que nos leva a quatro possíveis valores de λ , sob a condição $MB_\perp > 0$

$$\lambda_{1,2}^2 = \frac{2(EB_\perp - MD_\perp) \pm \sqrt{4(MD_\perp - EB_\perp) + (E^2 - M^2)}}{2B_+ B_-}. \quad (146)$$

A solução geral é portanto uma combinação linear das soluções possíveis correspondentes a cada λ . Impondo que as soluções se anulem em $z = 0$ e $z \rightarrow \infty$, obtemos⁵ para o primeiro auto-estado

$$|\Psi_1\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \\ b_1 \\ 0 \end{pmatrix} (e^{\lambda_1 z} - e^{\lambda_2 z}). \quad (147)$$

⁵ Apesar de parecer trivial, essa passagem é sutil. Um tratamento geral para problemas desse tipo é dado por Shan *et al* [46] e algo semelhante também pode ser encontrado no trabalho de Zhou *et al* [47].

onde as componentes estão relacionadas através de

$$\frac{a_1}{b_1} = \frac{iA\lambda_1}{B_+ \left(\lambda_1^2 - \frac{E}{D_\perp} \right)} = \frac{iA\lambda_2}{B_+ \left(\lambda_2^2 - \frac{E}{D_\perp} \right)}, \quad (148)$$

onde A é uma constante de proporcionalidade.

As equações (146) e (148) nos levam, para pequenos valores de p , à relação de dispersão $E = -\frac{MD_\perp}{B_\perp}$.

Além disso, impondo que a solução seja normalizada tem-se que

$$|a_1|^2 + |b_1|^2 = \left(\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2\lambda_1\lambda_2} - \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2} \right)^{-1}. \quad (149)$$

Para o outro auto-estado o procedimento é o mesmo, se deixarmos que $a_2 = -a_1$ e $b_2 = b_1$, e nos leva a

$$|\Psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ -a_1 \\ 0 \\ b_1 \end{pmatrix} (e^{\lambda_1 z} - e^{\lambda_2 z}). \quad (150)$$

que corresponde à mesma auto-energia de $|\Psi_1\rangle$, ou seja, $E = -\frac{MD_\perp}{B_\perp}$.

Daí, seguindo o que fizemos nas seções anteriores, projetamos a hamiltoniana (completa, ou seja, aqui $p_x, p_y \neq 0$) na base desses dois auto-estados,

$$H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \langle \Psi_1 | H | \Psi_1 \rangle & \langle \Psi_1 | H | \Psi_2 \rangle \\ \langle \Psi_2 | H | \Psi_1 \rangle & \langle \Psi_2 | H | \Psi_2 \rangle \end{pmatrix}, \quad (151)$$

de modo que obtemos como hamiltoniana efetiva

$$H_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \epsilon(p) & -v_{\text{eff}}(ip_x + p_y) \\ v_{\text{eff}}(ip_x - p_y) & \epsilon(p) \end{pmatrix} = \epsilon(p) + v_{\text{eff}}(p \times \sigma)_z, \quad (152)$$

onde $v_{\text{eff}} = \text{sgn}(B_\perp) \sqrt{1 - D_\perp^2/B_\perp^2} v_\parallel$ e $\epsilon(p) = C - D_\parallel (p_x^2 + p_y^2)$.

Exigindo

$$\det \begin{pmatrix} \epsilon(p) - E(p) & -v_{\text{eff}}(ip_x + p_y) \\ v_{\text{eff}}(ip_x - p_y) & \epsilon(p) - E \end{pmatrix} = 0, \quad (153)$$

obtemos para a relação de dispersão que

$$E_\pm = \epsilon(p) \pm v_{\text{eff}} \sqrt{p_x^2 + p_y^2} = \epsilon(p) \pm v_{\text{eff}} p. \quad (154)$$

Este modelo já possui uma propriedade importante que é a relação entre momento e spin. Se deixarmos que

$$\phi_p = \text{arctg}\left(\frac{p_y}{p_x}\right), \quad (155)$$

os estados correspondentes são

$$|\Psi_\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\phi_p} \\ i \end{pmatrix}, \quad (156)$$

de modo que podemos calcular facilmente a fase de Berry:

$$\begin{aligned}\gamma_{\pm} &= \oint d\phi_p \left\langle \Psi_{\pm} \left| i \frac{\partial}{\partial \phi_p} \right| \Psi_{\pm} \right\rangle \\ \gamma_{\pm} &= \frac{1}{2} (\pm e^{i\phi_p} - i) \begin{pmatrix} \pm i (-i) e^{-i\phi_p} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \gamma_{\pm} &= \pi.\end{aligned}\tag{157}$$

Ou seja, se transportarmos os estados dados pela equação (156) por um loop no espaço k , ganhamos uma fase de π . Exatamente o que esperaríamos de um material com topologia não trivial e *winding number* igual a 1. Este resultado é importante no que se refere às propriedades de transporte dos estados de superfície, como por exemplo a *anti-localização fraca*, que corresponde a um aumento na condutividade devido à um efeito de interferência que ocorre quando o caminho médio no qual o elétron consegue manter uma coerência de fase ser muito maior que o livre caminho médio (em outras palavras, o elétron mantém uma fase coerente mesmo após várias colisões).

Os Férmions de Majorana

4.1 Férmions de Majorana

Nas nossas discussões sobre a equação de Dirac, os spinores sempre foram pensados como objetos complexos. Contudo, podemos nos perguntar se é possível encontrar soluções puramente reais, como é o que acontece, por exemplo, na equação de Klein-Gordon. A maneira mais simples de começar a atacar essa questão é simplesmente escolher uma base adequada. Consideremos novamente a equação de Dirac livre na sua forma covariante

$$(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi(x) = 0, \quad (158)$$

note que se as matrizes γ_μ forem escolhidas como sendo puramente imaginárias, as soluções ψ serão puramente reais, ou seja, satisfarão $\psi = \psi^*$. Em 1937, Ettore Majorana encontrou [48]¹ uma base que satisfaz essas condições, e que, em termos das matrizes de Pauli, é dada por

$$\begin{aligned} \tilde{\gamma}^0 &= \sigma_2 \otimes \sigma_1; \\ \tilde{\gamma}^1 &= i\sigma_1 \otimes \mathbb{1}; \\ \tilde{\gamma}^2 &= i\sigma_3 \otimes \mathbb{1}; \\ \tilde{\gamma}^3 &= i\sigma_2 \otimes \sigma_3. \end{aligned} \quad (159)$$

¹ Uma tradução para o inglês pode ser encontrada na referência [49].

ou ainda, explicitando as matrizes temos

$$\begin{aligned}
 \tilde{\gamma}^0 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
 \tilde{\gamma}^1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\
 \tilde{\gamma}^2 &= \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \end{pmatrix}; \\
 \tilde{\gamma}^3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{160}$$

essa representação para as matrizes gamma, claro, ficou conhecida como *base de Majorana* e as soluções reais ψ são chamadas de *spinors de Majorana*. Apesar de já gerar resultados interessantes, a simples mudança de representação é apenas um artifício matemático e nos leva a questionar o que ocorre em uma base qualquer. Para conseguir definir os *Férmions de Majorana* de maneira independente da base, recorreremos ao conceito de conjugação de carga.

Lembre que podemos definir uma operação de conjugação de carga tal que $\psi_c = \mathcal{C}\psi$, e como vimos, ψ_c também satisfaz a equação de Dirac, mas a partícula descrita tem a carga oposta à de ψ . A única exigência necessária aqui é que $(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0$ e $(\gamma^i)^\dagger = -\gamma^i$, para que os argumentos usados anteriormente continuem válidos. Posto isto, definimos que são spinors de Majorana aqueles que satisfazem

$$\psi_c = \psi. \tag{161}$$

A consequência imediata dessa definição é que os Férmions de Majorana são partículas *neutras* e, mais ainda, são suas *próprias antipartículas*. Aqui, podemos antecipar um fato importante. Lembre-se que em física da matéria condensada a conjugação de carga está relacionada com a simetria entre partículas e buracos. A definição (161) nos diz, portanto, que o aparecimento de Férmions de Majorana só se dará em sistemas de matéria condensada que possuem essa simetria.

4.2 Férmions de Majorana em Supercondutores

Apesar de haverem propostas para o caso dos neutrinos [50], partículas fundamentais que sejam Férmions de Majorana ainda não foram observados na natureza. Contudo, em sólidos o comportamento coletivo de elétrons (que são férmions tipo Dirac) pode dar origem à *quase-partículas* que se comportam como Férmions de Majorana, ou seja, nesses sistemas encontramos quase-partículas que são suas próprias “*anti-quase-partículas*”.

Deixemos que o operador c_j^\dagger represente a criação de um elétron cujos números quânticos são representados por j (se refere tanto aos graus de liberdade espaciais quando os de spin). Por conseguinte, c_j^\dagger também representa a aniquilação de um buraco com mesmos números quânticos. Por outro lado, $c_j \equiv (c_j^\dagger)^\dagger$, representa a aniquilação de um elétron com números quânticos j ou a criação de um buraco. Como descrevem elétrons, ou seja, partículas de spin- $\frac{1}{2}$, estes operadores obedecem a estatística de *Fermi-Dirac* e por tanto, são válidas as relações de anti-comutação

$$\{c_j, c_k\} = \{c_j^\dagger, c_k^\dagger\} = 0 \quad \text{e} \quad \{c_j^\dagger, c_k\} = \delta_{jk}. \quad (162)$$

Perceba ainda que aqui, a conjugação de carga leva c_j^\dagger em c_j . Sem perder generalidade, podemos fazer uma mudança de base tal que

$$c_j = \frac{1}{2}(\gamma_{j1} + i\gamma_{j2}) \quad \text{e} \quad c_j^\dagger = \frac{1}{2}(\gamma_{j1} - i\gamma_{j2}). \quad (163)$$

nesse caso dizemos que os operadores c_j e c_j^\dagger estão escritos na base de Majorana². E se invertermos a equação (163) obtemos

$$\gamma_{j1} = c_j^\dagger + c_j, \quad \gamma_{j2} = i(c_j^\dagger - c_j). \quad (164)$$

Esses operadores satisfazem as relações

$$\{\gamma_{i\alpha}, \gamma_{j\beta}\} = 2\delta_{ij}\delta_{\alpha\beta}, \quad \gamma_{i\alpha}^\dagger = \gamma_{i\alpha}. \quad (165)$$

note que a última dessas relações, nos diz que a partícula criada por $\gamma_{i\alpha}$ é a sua própria anti-partícula, exatamente o que esperamos de um Férmion de Majorana.

O procedimento adotado para estabelecer as relações (163) é completamente geral, e portanto poderíamos adotá-lo para descrever qualquer sistema formado por elétrons. A questão é que, em geral, não é útil fazer essa mudança de base já que, em princípio, estamos tratando em partes separadas ($\gamma_{i\alpha}$) uma estrutura (c_j^\dagger) que representa uma única entidade, o estado eletrônico correspondente aos números quânticos j . Nesse sentido, estamos dizendo que precisamos de dois Férmions de Majorana para formar um elétron. É por isso que é frequente encontrar na literatura o termo “*half-fermions*”, em referência a eles.

² Aqui, é necessário comentar sobre a notação. Perceba que apesar de estar novamente utilizando o símbolo γ , estes operadores γ_j não são as matrizes gamma da equação de Dirac. Eles são operadores que representam a criação de Férmions de Majorana.

Apesar disso, existem sistemas, que convencionou-se serem chamados de *supercondutores topológicos*, em que dois Férmions de Majorana que formam um elétron, podem se tornar espacialmente separados. Neste caso, estes estados são robustos em relação a perturbações locais de energia, já que estas só afetam um dos Majoranas, fazendo com que esses estados sejam interessantes para armazenamento de informação. Outra propriedade interessante desses estados é o chamado *braiding*, sobre o qual faremos um breve comentário mais adiante, e surge devido às propriedades estatísticas desses férmions.

Em supercondutores, a baixas energias próximas à energia de Fermi, há o aparecimento de uma força atrativa entre elétrons, que favorece a formação de pares³. Esses pares são chamados de *pares de Cooper*, e quando descritos como uma única estrutura, se comportam como bósons, e podem portanto, formar um condensado ao longo do supercondutor. É esse condensado de pares de Cooper o responsável pelo fenômeno da supercondutividade.

Um elétron pode atingir uma configuração de ainda menos energia, em relação ao seu estado fundamental, se for formado um par de Cooper em superposição com um buraco⁴. É por isso, que em supercondutores se formam modos que são representados por operadores da forma

$$\cos \theta c_j + \sin \theta c_k^\dagger, \quad (166)$$

no formalismo chamado de *Formalismo de Bogoliubov-Valatin*. Os modos descritos pelas relações (166) são chamados de *modos de Bogoliubov-Valatin*. Perceba que para o caso $j = k$ e $\theta = \pm \frac{\pi}{4}$ obtemos o tipo de superposição que esperamos para Férmions de Majorana, ou seja, aquela em que partícula e buraco tem os mesmos coeficientes. Antes de prosseguir, vale a pena observar algumas propriedades importantes dos pares de Cooper. 1) Pares de Cooper podem ser adicionados ou removidos do condensado, sem que suas propriedades sejam alteradas. Ou seja, não há conservação do número de elétrons. 2) A carga não é mais observada. O supercondutor blindia campos elétricos e confina campos magnéticos⁵.

A questão agora é como encontrar esses Férmions de Majorana e entender sob que condições eles aparecem. Nesta monografia trataremos apenas o caso mais simples de supercondutor com a presença de Férmions de majorana, que é um “*toy model*” proposto por Kitaev [51].

4.2.1 A cadeia de Kitaev

Consideramos um *nanofio* supercondutor (com funções de onda tipo p) e sem spin. Neste sistema há um forte acoplamento spin-órbita e um forte efeito Zeeman. Sob essas

³ Com “favorece”, me refiro ao fato de essa ser a configuração de menor energia

⁴ Ou, mais precisamente, com o modo correspondente a um buraco no sistema.

⁵ Essa propriedade torna razoável o fato de haverem partículas invariantes por conjugação de carga em supercondutores, como é o caso dos Férmions de Majorana.

condições, o modelo unidimensional para a rede é dado por

$$H = -\sum_{i=1}^N \mu_i c_i^\dagger c_i - \sum_{i=1}^{N-1} \left(t c_i^\dagger c_{i+1} + \Delta c_i c_{i+1} + \text{h.c.} \right), \quad (167)$$

onde μ_i se refere ao potencial químico, e será tomado como idêntico para todos os sítios e constante, $\mu_i = \mu$. $c_i^\dagger c_i \equiv n_i$ é o operador número de elétrons, t se refere ao chamado *hopping*, que é uma amplitude que está associada à probabilidade de um elétron transitar entre os sítios i e $i+1$, e é tomado como sendo o mesmo para todos os sítios da rede. Por fim, Δ se refere ao *gap* do supercondutor⁶.

Considere novamente as transformações

$$\gamma_{j,1} = c_j^\dagger + c_j, \quad \gamma_{j,2} = i(c_j^\dagger - c_j). \quad (168)$$

Se tomarmos o sistema como estando no limite $\mu = 0$ e $\Delta = t$, podemos reescrever

$$H = -t \sum_{i=1}^{N-1} \left((i\gamma_{i,2} - \gamma_{i,1})(\gamma_{i+1,1} + i\gamma_{i+1,2}) + (\gamma_{i,1} + i\gamma_{i,2})(\gamma_{i+1,1} + i\gamma_{i+1,2}) + \text{h.c.} \right) \quad (169)$$

$$H = -\frac{t}{4} \sum_{i=1}^{N-1} (2i\gamma_{i,2}\gamma_{i+1,1} - 2\gamma_{i,2}\gamma_{i+1,1} + \text{h.c.}).$$

Na hamiltoniana (169), os termos que não estão multiplicados por i não são hermitianos e podem ser descartados. Daí, após somar a parte hermitiana conjugada, temos

$$H = -it \sum_{i=1}^{N-1} \gamma_{i,2} \gamma_{i+1,1}. \quad (170)$$

Pode parecer que não ganhamos nenhuma informação relevante com este procedimento, mas note que os operadores $\gamma_{N,2}$ e $\gamma_{1,1}$, localizados em extremos diferentes da cadeia, não estão presentes na hamiltoniana (170)! Isso significa que estes operadores correspondem a modos que não contribuem para a energia, ou seja, modos de energia zero. Agora sim, como esses *modos de Majorana de energia zero* (MMEZ) estão espacialmente separados, veja figura 12, faz sentido pensá-los como estruturas físicas de existência individual.

Para reforçar o argumento, nos atentamos para o fato de que colocar a hamiltoniana original (167) na forma descrita na equação (170), não é nada mais do que escrevê-la em sua forma diagonal. Podemos explicitar isso se construirmos operadores fermiônicos, \tilde{c}_i , que combinem operadores de Majorana vizinhos

$$\tilde{c}_i = \frac{1}{2} (\gamma_{i+1,1} + i\gamma_{i,2}). \quad (171)$$

O que nos leva a

$$2\tilde{c}_i^\dagger \tilde{c}_i = 2\tilde{n}_i = 2 \left(\frac{\gamma_{i+1,1}^\dagger - i\gamma_{i,2}^\dagger}{2} \right) \left(\frac{\gamma_{i+1,1} + i\gamma_{i,2}}{2} \right) = -i\gamma_{i,2}\gamma_{i+1,1}, \quad (172)$$

⁶ A presença de um *gap* nas bandas de um supercondutor, centrado na energia de Fermi, tem origem na interação *elétron-rede-elétron* e, em oposição ao que ocorre em isolantes, não impede a condução.

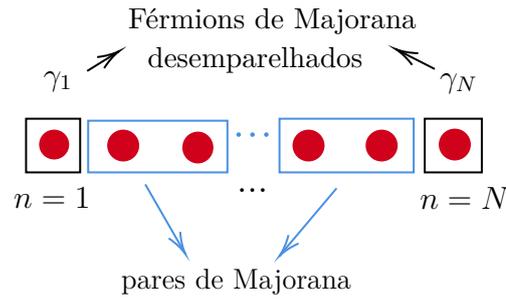


Figura 12: Ilustração da cadeia de Kitaev. Os sítios em vermelho correspondem a férmions de Majorana, os quadrados azuis correspondem a estados eletrônicos completos e os quadrados pretos a modos desemparelhados.

e ficamos com

$$H = 2t \sum_{i=1}^{N-1} \tilde{c}_i^\dagger \tilde{c}_i. \quad (173)$$

Assim, excitar um modo fermiônico tem um custo de energia de $2t$. Observe novamente que o operador correspondente aos dois modos de Majorana de energia zero faltantes é dado por

$$\tilde{c}_M = \frac{1}{2} (\gamma_{1,1} + i\gamma_{N,2}). \quad (174)$$

Aqui fica claro que temos um modo altamente deslocalizado pelo fato de $\gamma_{1,1}$ e $\gamma_{N,2}$ estarem em extremidades opostas, e como, novamente, \tilde{c}_M não aparece na expressão (174), o custo energético para popular esse modo é zero.

Apesar de termos descrito apenas o caso particular $\mu = 0$ e $\Delta = t$, é possível mostrar [51] que a presença desses modos de majorana de energia zero é garantida pela condição menos restritiva $|\mu| < 2t$. Além disso estes modos continuam a ter energia zero, desde que a cadeia seja longa o suficiente para evitar que eles se sobreponham.

4.3 Sobre o que os torna especiais

Como o objetivo desta monografia é explorar uma fração das possibilidades trazidas pela teoria de Dirac à física da matéria condensada, dando uma dimensão do impacto que ela teve nessa área da física, uma discussão elementar e introdutória sobre os Férmions de Majorana, como a oferecida, já é suficiente. Contudo, nessa seção, buscando justificar o crescente interesse da comunidade científica nesta área e direcionar o leitor para um aprofundamento no tema, faremos uma discussão qualitativa sobre algumas propriedades importantes e possibilidades de aplicação.

Supercondutores em que há o aparecimento de modos de energia zero de Majorana, como na cadeia de Kitaev, são ditos serem *topológicos*. Isto porque, apesar de termos mostrado diretamente a presença deles, uma alternativa possível seria caracterizar a topologia do *bulk*. No caso de supercondutores 1D isso pode ser feito utilizando o *número*

de *majorana*⁷ (\mathcal{M}). Ele pode assumir os valores 1 e -1 . Este último se refere ao caso em que a topologia é não trivial e há o aparecimento de um número ímpar (ou seja, que formam estados deslocalizados) de MMEZ nos extremos da cadeia.

Quantitativamente, para avaliar o valor de \mathcal{M} , nota-se primeiramente que a hamiltoniana de um sistema de férmions não interagentes qualquer, pode ser escrito usando a representação de Majorana como

$$\mathcal{H} = \frac{i}{4} \sum_{lma\beta} B_{a\beta}(l-m) \gamma_{l\alpha} \gamma_{m\beta}, \quad (175)$$

onde l e m se referem a sítios da rede e α e β se referem a todos os outros números quânticos. Daí, o número de Majorana é definido como

$$\mathcal{M} = \text{sgn}\{\text{Pf}[\tilde{B}(0)] \text{Pf}[\tilde{B}(\pi)]\} \quad (176)$$

onde $\tilde{B}(q)$ denota a transformada de Fourier espacial de $B(l-m)$ vista como uma matriz com índices α, β e $\text{Pf}[A]$ denota o Pfaffian⁸. Este resultado foi derivado pela primeira vez pelo próprio Kitaev, no mesmo artigo [51] em que propôs o seu *toy model*, onde conclui-se que $\mathcal{M} = -1$ na cadeia de Kitaev, quando $|\mu| < 2t$.

Em geral, para descrição de sistemas de topologia não trivial (que acomodem MMEZ), exigimos que a hamiltoniana comute com os MMEZ, i.e,

$$[H, \gamma_i] = 0 \quad (177)$$

perceba então que os estados excitados $\gamma_i |G\rangle$ possuem a mesma energia do estado fundamental, $|G\rangle$. Ou seja, a presença de MMEZ nos leva a degenerescência no estado fundamental.

Em partículas fermiônicas comuns (que obedecem estatística de Fermi-Dirac), se em uma cadeia, por exemplo, trocamos as posições de dois férmions a função de onda do sistema ganha uma fase (um sinal de menos). Se, por outro lado, estivermos lidando com bósons (que, por definição satisfazem a estatística de Bose-Einstein) a função de onda permanece inalterada, ou ainda, ganha uma fase igual a 1. Quando, após uma troca de posição, a função de onda de uma partícula é alterada por uma fase de maneira não-trivial (ao invés de apenas ser multiplicada por ± 1 , ela pode ser rotacionada por um certo ângulo por exemplo), e portanto não se comporta como férmion ou bóson, damos a essa partícula o nome de *anyon*.

Modos de Majorana de energia zero, são *anyons* onde, adicionalmente, quando alteramos a ordem das trocas, também alteramos a função de onda resultante. Esta última propriedade confere aos MMEZ uma estatística *não-Abeliana* e as operações de trocas referidas são chamadas de *braiding*. Por possuir tais propriedades, os MMEZ tem se

⁷ Observe que este número aqui cumpre um papel análogo ao do *winding number* na nossa discussão sobre isolantes topológicos.

⁸ Raiz quadrada do determinante com um sinal definido

mostrado promissor para aplicações em computação quântica [52, 53]. Uma discussão introdutória sobre *anyons* não-Abelianos pode ser encontrada na referência [54].

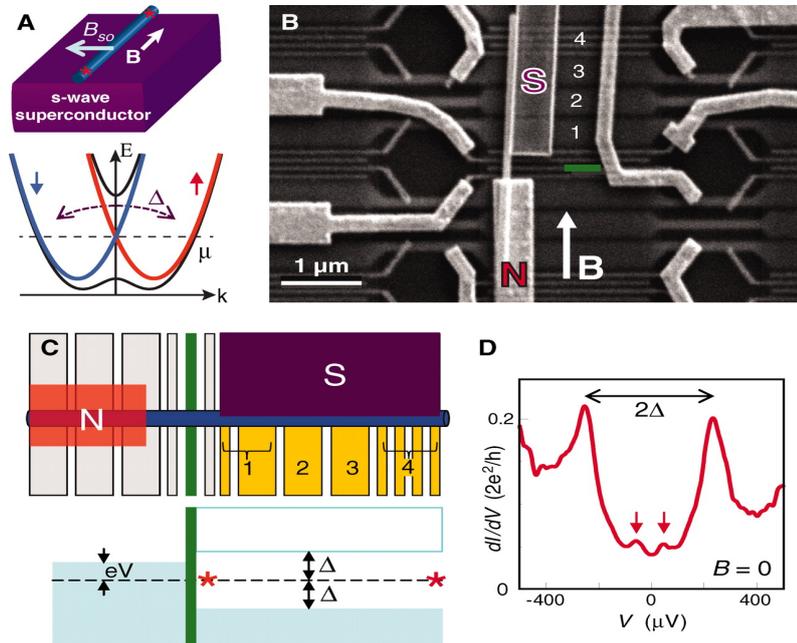


Figura 13: Adaptado da referência [3]. (A) Resumo das propostas teóricas. (Em cima) Dispositivo idealizado com um nanofio semiconductor na proximidade de um supercondutor de ondas-s. Um campo magnético externo B é alinhado paralelo ao fio. O spin-órbita Rashba é indicado como um campo magnético efetivo, B_{so} , apontando na direção perpendicular ao nanofio. As estrelas vermelhas indicam as posições esperadas do par de Majorana. (Em baixo) Energia, E , por momento, k , para um fio 1D com interação spin-órbita Rashba, que desloca a banda spin-down (azul) para a esquerda e a banda spin-up (vermelho) para a direita. As parábolas azul e vermelho são para o caso $B=0$; curvas pretas são para $B \neq 0$, ilustrando a formação de um *gap* próximo a $k=0$ de tamanho E_z (μ é a energia de Fermi com $\mu = 0$ definida no cruzamento das parábolas em $k=0$). O supercondutor induz um emparelhamento entre os estados de momentos e spin opostos, criando um *gap* de tamanho Δ . (B) Implementando as propostas teóricas. imagem de escaneamento microscópico eletrônico de um dispositivo com um contato normal (N) e um contato supercondutor (S). O contato S cobre apenas a parte direita do nanofio. Os portões na base, numerados de 1 a 4, estão cobertos com um dielétrico. [Em (B), a barreira de potencial do portão também é mostrada em verde.] Uma voltagem externa, V , aplicada entre N e S cai através da barreira de tunelamento. Estrelas vermelhas indicam, novamente, as posições esperadas para o par de majorana. Apenas o Majorana da esquerda é investigado nesse experimento. (D) Exemplo de condutância diferencial, dI/dV , por V com $B = 0$ e $b = 65$ mk, servindo como uma medida espectroscópica da densidade de estados na região do nanofio abaixo do supercondutor. Dados são do dispositivo 1. Os dois picos grandes indicados pelas setas, separados por 2Δ , correspondem às singularidades das quase-partículas abaixo do *gap* induzido. Dois picos menores de *subgap*, indicados por setas, correspondem provavelmente aos estados ligados de Andreev localizados simetricamente ao redor da energia zero. Medidas são feitas em refrigeradores de diluição com o uso de técnicas tradicionais de baixa frequência “*lock-in*” (frequência = 77 Hz, excitação = $3 \mu V$) com geometria de corrente-voltagem de quadri-terminal (dispositivos 1 e 3) ou bi-terminal (dispositivo 2).

Por fim, um breve comentário sobre as realizações experimentais na área. A primeira evidência experimental dos MMEZ foi apresentada em 2012 [3]. O experimento consistiu essencialmente em conectar um eletrodo supercondutor (nitreto de titânio e nióbio) e um eletrodo comum (ouro) através de um nanofio de antimoneto de índio ($InSb$) na presença de um campo magnético aplicado ao longo do eixo do nanofio, ver figura 13. Daí, fazendo-se variar uma diferença de potencial externa definiu-se uma barreira de tunelamento, entre o contato normal e o supercondutor. A teoria prevê que devem aparecer MMEZ nos extremos do eletrodo supercondutor, e isso é verificado medindo a corrente de tunelamento. Perceba que devido ao *gap* do supercondutor, é o aparecimento desses modos que permite que o tunelamento ocorra. Esta corrente é, em uma boa aproximação, proporcional a densidade de estados no extremo do fio supercondutor adjacente ao contato de tunelamento. O campo magnético é variado de valores de 90 mT à valores superiores à 400 mT e um pico consistente com as previsões teóricas é visto na condutância $g(V) = \frac{dI}{dV}$. Esse resultado foi repetido por outros grupos nos anos seguintes [55, 56].

Apesar do aparente sucesso, há questionamentos na literatura sobre a validade da interpretação dos experimentos, já que os resultados também podem ser explicados por presença de desordem ou de múltiplas bandas de energia. A busca experimental pelos Férmions de Majorana segue, deste modo, sendo um desafio. Mais sobre esse assunto pode ser encontrado nos artigos de revisão [57, 58].

Conclusão

Nesta monografia buscou-se compreender porque os trabalhos de Paul Dirac, concebidos no domínio da física das altas energias, têm se tornado tema de interesse dos físicos da matéria condensada. Passeamos pela física dos Isolantes Topológicos e dos Férmions de Majorana em Supercondutores Topológicos, dois temas de grande interesse devido às possibilidades de aplicações tecnológicas.

No caso dos Isolantes Topológicos, vimos como a equação de Dirac, após a introdução de um termo quadrático, é bem sucedida na construção de modelos efetivos para os estados de superfície que se formam nas bordas (ou extremos, no caso 1D) desses sistemas. Como argumentamos, ela é naturalmente adequada para a descrição de estados de borda, e a introdução do termo quadrático a permite distinguir regiões topologicamente não equivalentes. Por fim, foi feita uma discussão elementar sobre os estados de borda do Bi_2Se_3 , utilizando um modelo efetivo que consiste em uma equação tipo-Dirac. Esses estados apresentaram relações de dispersão lineares com o momento e foi visto que eles adquirem uma fase de π quando transportada por um loop no espaço k .

Já no fim deste texto, foi discutido como os Férmions de Majorana surgem da exigência de soluções puramente reais para a equação de Dirac, e como isto os confere a característica de serem suas próprias anti-partículas. Vimos como estes férmions emergem como quase-partículas na descrição de supercondutores topológicos, utilizando o caso da cadeia de Kitaev como exemplo. Foram feitos alguns comentários sobre propriedades que tornam os Férmions de Majorana assunto de interesse para a física e áreas de aplicação tecnológica, e por fim, comentou-se sobre as detecções experimentais dessas partículas.

Referências

- [1] Keenan's 3D Model Repository. Disponível em: <http://www.cs.cmu.edu/~kmcrane/Projects/ModelRepository/>.
- [2] C. Liu, X. Qi, H. Zhang, Xi Dai, Z. Fang, and S. Zhang. Model hamiltonian for topological insulators. *Physical Review B*, 82, 05 2010.
- [3] V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, and L. P. Kouwenhoven. Signatures of majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices. *Science*, 336(6084):1003–1007, 2012.
- [4] G. Farmelo e B. Ashrafi. The Strangest Man: The Hidden Life of Paul Dirac, Mystic of the Atom. *Physics Today - PHYS TODAY*, 62, 12 2009.
- [5] F. Caruso. *Dirac*. Livraria da Física, 2013.
- [6] P. A. M. Dirac e R. H. Fowler. The fundamental equations of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 109(752):642–653, 1925.
- [7] P. A. M. Dirac. On the theory of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 112(762):661–677, 1926.
- [8] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 117(778):610–624, 1928.
- [9] P. A. M. Dirac. The quantum theory of the electron. part ii. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 118(779):351–361, 1928.

-
- [10] Paul Dirac and The Religion of Mathematical Beauty (Perimeter Public Lectures). Disponível em: <https://perimeterinstitute.ca/videos/paul-dirac-and-religion-mathematical-beauty-0>.
- [11] Physics + Dirac = poetry. Disponível em: <https://www.theguardian.com/science/2002/feb/21/maths.scienceandnature>.
- [12] H. Kragh. Equation with the many fathers. the klein–gordon equation in 1926. *American Journal of Physics*, 52(11):1024–1033, 1984.
- [13] A. Messiah. *Quantum mechanics: Volume 2*. North-Holland, 1986.
- [14] J. J. Sakurai. *Advanced quantum mechanics*. Addison-Wesley Pub. Co, Reading, Mass, 1967.
- [15] E. H. Hall. On a new action of the magnet on electric currents. *American Journal of Mathematics*, 2(3):287–292, 1879.
- [16] E.H. Hall. Xviii. on the “rotational coefficient” in nickel and cobalt. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 12(74):157–172, 1881.
- [17] M. I. D’Yakonov e V. I. Perel’. Possibility of Orienting Electron Spins with Current. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 13:467, June 1971.
- [18] J. E. Hirsch. Spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 83:1834–1837, Aug 1999.
- [19] S. Murakami, N. Nagaosa, and S. Zhang. Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science*, 301(5638):1348–1351, 2003.
- [20] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, and A. H. MacDonald. Universal intrinsic spin hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 92:126603, Mar 2004.
- [21] F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015–2018, Oct 1988.
- [22] S. Shen. *Topological Insulators: Dirac Equation in Condensed Matters*. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [23] C. L. Kane e E. J. Mele. Quantum spin hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95:226801, Nov 2005.
- [24] L. Majorana, E. e Maiani. *A symmetric theory of electrons and positrons*, pages 201–233. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2006.
- [25] E. Akhmedov. Majorana neutrinos and other majorana particles:theory and experiment. 12 2014.

-
- [26] C. L. Fu, L. e Kane. Superconducting proximity effect and majorana fermions at the surface of a topological insulator. *Phys. Rev. Lett.*, 100:096407, Mar 2008.
- [27] P. A. M. Dirac. *The principles of quantum mechanics*. International Series of Monographs on Physics (Book 27). Clarendon Press, The address, 4 edition, 1982.
- [28] Paul Dirac Interview, Göttingen 1982. Disponível em: <https://www.youtube.com/watch?v=Et8-gg6XNDY>.
- [29] Steven Weinberg. *The Quantum theory of fields. Vol. 1: Foundations*. Cambridge University Press, 2005.
- [30] P. A. M. Dirac. Theory of electrons and positrons. Disponível em: <https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/dirac-lecture.pdf>.
- [31] C. D. Anderson. The positive electron. *Phys. Rev.*, 43:491–494, Mar 1933.
- [32] J. Barcelos Neto. *Matemática Para Fisicos com Aplicacoes: Vetores, Tensores e Spinors - Vol.1*. Livraria da Física, 1 edition, 2010.
- [33] H. Quang e X. Pham. *Elementary particles and their interactions: concepts and phenomena*. 1998.
- [34] F. Schwabl. *Advanced Quantum Mechanics*. 01 2008.
- [35] W. Greiner. *Relativistic Quantum Mechanics. Wave Equations*. 01 2000.
- [36] F. Gross. *Relativistic Quantum Mechanics and Field Theory*. Wiley Science Paperback Series, 1993.
- [37] W. Greiner. *Quantum Mechanics. An Introduction*. 2001.
- [38] N. Batra e G. Sheet. Understanding basic concepts of topological insulators through su-schrieffer-heeger (ssh) model, 2019.
- [39] B. A. Bernevig e T. L. Hughes. *Topological Insulators and Topological Superconductors*. Princeton University Press, stu - student edition edition, 2013.
- [40] P. Marconcini e M. Macucci. The k.p method and its application to graphene, carbon nanotubes and graphene nanoribbons: the dirac equation, 2011.
- [41] C. Jackiw, R. e Rebbi. Solitons with fermion number. *Phys. Rev. D*, 13:3398–3409, Jun 1976.
- [42] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. Hor, R. Cava, e M. Z. Hasan. Observation of a large-gap topological-insulator class with a single dirac cone on the surface. *Nature Physics*, 5:398–402, 05 2009.

- [43] G. Martinez, B. Piot, M. Hakl, M. Potemski, Y. Hor, A. Materna, S. Strzelecka, A. Hruban, O. Caha, J. Novák, A. Dubroka, C. Drasar, and M. Orlita. Determination of the energy band gap of Bi_2Se_3 . *Scientific Reports*, 7, 12 2017.
- [44] M. Zhang, T.T. Song, L.G. Liu, Q.Y. Liu, T.X. Zeng, and H. Yang. Experimental and first-principles study of defect structure of topological insulator Bi_2Se_3 single crystal. *Superlattices and Microstructures*, 120, 05 2018.
- [45] H. Zhang, C. Liu, X. Qi, X. Dai, Zhong Fang, and S. Zhang. Topological insulators in Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 and Sb_2Te_3 with a single Dirac cone on the surface. *Nature Physics*, 5:438–442, 05 2009.
- [46] W. Shan, H. Lu e S. Shen. Effective continuous model for surface states and thin films of three-dimensional topological insulators. *New Journal of Physics*, 12(4):043048, apr 2010.
- [47] B. Zhou, H. Lu, R. Chu, S. Shen, and Q. Niu. Finite size effects on helical edge states in a quantum spin-hall system. *Phys. Rev. Lett.*, 101:246807, Dec 2008.
- [48] E. Majorana. Teoria simmetrica dell’elettrone e del positrone. *Il Nuovo Cimento (1924-1942)*, 14(4):171, Apr 1937.
- [49] G. F. Bassani. *Ettore majorana scientific papers: On occasion of the centenary of his birth*. 01 2006.
- [50] R. S. Elliott e M. Franz. Colloquium: Majorana fermions in nuclear, particle, and solid-state physics. *Rev. Mod. Phys.*, 87:137–163, Feb 2015.
- [51] A. Y. Kitaev. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. *Phys. Usp.*, 44(10S):131–136, 2001.
- [52] M. Sarma, S. Das e Freedman and C. Nayak. Majorana zero modes and topological quantum computation. *npj Quantum Information*, 1(1), Oct 2015.
- [53] C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma. Non-abelian anyons and topological quantum computation. *Reviews of Modern Physics*, 80(3):1083–1159, Sep 2008.
- [54] S. Rao. Introduction to abelian and non-abelian anyons, 2016.
- [55] A. Das, Y. Ronen, Y. Most, Y. Oreg, M. Heiblum, and H. Shtrikman. Zero-bias peaks and splitting in an Al-InAs nanowire topological superconductor as a signature of Majorana fermions. *Nature Physics*, 8(12):887–895, Nov 2012.

-
- [56] H. O. H. Churchill, V. Fatemi, K. Grove-Rasmussen, M. T. Deng, P. Caroff, H. Q. Xu, and C. M. Marcus. Superconductor-nanowire devices from tunneling to the multichannel regime: Zero-bias oscillations and magnetoconductance crossover. *Phys. Rev. B*, 87:241401, Jun 2013.
- [57] T. D. Stanescu e S. Tewari. Majorana fermions in semiconductor nanowires: fundamentals, modeling, and experiment. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25(23):233201, May 2013.
- [58] R. M. Lutchyn, E. P. A. M. Bakkers, L. P. Kouwenhoven, P. Krogstrup, C. M. Marcus, and Y. Oreg. Majorana zero modes in superconductor-semiconductor heterostructures. *Nature Reviews Materials*, 3(5):52–68, 5 2018. [Qdev].